·近代物理学丛书·

群论与
高等量子力学导论

熊钰庆　何宝鹏编著

广东科技出版社

·近代物理学丛书·

群论与高等量子力学导论

熊钰庆　何宝鹏　编著

广东科技出版社

粤新登字 04 号

内 容 提 要

本书分两篇. 第一篇（第一至四章）是希尔伯特空间与群论基础，阐述抽象群、希尔伯特空间、有限群的表示理论、连续群及其表示等内容. 第二篇（第五至十一章）是高等量子力学，阐述量子力学的基本原理、对称性、角动量、散射理论、相对论量子力学、二次量子化、路径积分量子化等内容. 第一篇的内容为学习第二篇提供必备的数学基础知识和工具.

本书可作高等院校物理系为本科学生、研究生开设的高等量子力学课程的教学参考书，也可供有关专业的科研教学人员阅读参考.

近代物理学丛书

Qunlun yu Gaodeng Liangzilixue Daolun

群论与高等量子力学导论

编 著 者：熊钰庆 何宝鹏
出版发行：广东科技出版社（广州市环市东路水荫路 11 号）
经　　销：广东省新华书店
电脑排版：全通电脑公司
印　　刷：广州番禺印刷厂
规　　格：850×1168 1/32 印张 14.5 字数 380 000
版　　次：1991 年 8 月第 1 版 1991 年 8 月 第 1 次印刷
印　　数：1— 1 000 册
ISBN 7—5359—0863—2/O · 56
定　　价：8.00 元

前　言

量子力学（quantum mechanics）是研究微观物质世界运动规律的理论，是现代物理学的理论基础和支柱. 自从 1900 年普朗克（Planck）提出能量子假说，开创了量子论的新纪元以后，1925 年海森堡（Heisenberg）创立了矩阵力学，1926 年薛定谔（Schrödinger）创立了波动力学，从而宣告了量子力学的诞生. 此后，人们开始冲破经典物理学的框框，对微观世界奥秘的探索向前跨进了一大步. 半个多世纪以来，量子力学理论已深入到物理学各个领域和化学、生物学的某些领域，得到极其广泛的应用，经历了无数实践的考验.

随着量子力学应用范围的扩大和认识的深化，量子力学的基本概念和基本理论也得到相应的发展，出现了不少新的理论和方法. 例如，量子力学的普遍表述——狄喇克（Dirac）的态矢量空间理论体系，对称性理论，形式散射理论，二次量子化理论，相对论量子力学以及路径积分量子化方法等. 以上几个方面大致上构成高等量子力学（advanced quantum machanics）的内容. 本书第二篇基本上阐述这些内容.

量子力学理论应用于原子、分子、原子核和"基本"粒子，以及电磁场与物质的相互作用等方面，形成了量子力学理论发展的另一个重要方向，并创立了量子电动力学（QED）和量子场论（quantum field theory）. 最先将电磁场量子化并提出电磁场能量的不连续性理论的是狄喇克（1927 年）. 接着，人们将非相对论薛定谔方程进行量子化，即所谓二次量子化，并将二次量子化描述方法推广到相对论领域，将玻色子场和费米子场进行量子化，从而构成了量子场论.

由于量子力学理论进一步应用于凝聚态和光的受激发射等物理现

象，以及化学、生物学等方面，极大地推动了这些学科的发展，形成了量子统计和凝聚态理论，激光物理学，以及量子化学和量子生物学等新兴学科.

总之，越来越多的实践证明，量子力学理论是人们认识和改造微观物质世界的不可缺少的工具. 随着它在各个领域的应用范围的扩大和深化，量子力学理论本身也得到了进一步的发展.

高等量子力学不仅在量子力学的基本概念和基本理论上有所深化，同时也进一步发展了数学方法，其中最重要的是希尔伯特空间理论和群论. 因此，本书第一篇将简要地介绍这些数学方法，作为学习高等量子力学的基础. 这样，可以尽量地使数学方法与理论体系组成一体，前后连贯，便于学习和查阅.

本书是在近年来为研究生开设的高等量子力学课程编写的《高等量子力学》和《矢量空间与群论基础》两本讲义的基础上修改而成的. 这两本讲义的初稿完成于 1983 年夏，经 1984 年春和 1986 年秋两次修订，试用多年，颇有称誉. 现将两讲义合并，全面修订后交付出版，敬希同仁、读者批评指正.

在本书出版之际，谨向北京师范大学喀兴林教授和北京大学曾谨言教授表示衷心的感谢. 编者曾多次聆听两位教授的讲学，获益不浅，喀先生的《高等量子力学》讲义和曾先生的《量子力学》专著也是编者经常拜读和参考的读物. 这些，都给我们的编写工作以很多启发和帮助. 此外，华南师范大学物理系试用过原讲义的教师们为本书的编写提了许多宝贵意见，在此一并感谢.

在普朗克划时代的量子论诞生九十周年之际，编者谨以拙作奉献给读者，并且满怀信心地期望，量子力学将在科学之林中显示出自己更强的生命力.

编　者

1990 年 4 月，广州

目　录

第一篇　希尔伯特空间与群论基础

希尔伯特空间(Hilbert space)是建立量子力学的数学框架,物理可观察量用希尔伯特空间中的算符表示,而物理态用此空间中的矢量表示.群论则是处理对称性物理体系的一种有力的数学工具.群论与希尔伯特空间又密切相关,群表示就是群元素在希尔伯特空间中对应算符的映象,它们之间存在一一对应关系.

本篇内容是第二篇高等量子力学的数学基础,为第二篇涉及的内容提供简明的必备知识.

第一章 抽象群的基本概念

群(group)的概念开始于150多年前,即19世纪初叶.群论(group theory)的早期发展归功于著名的数学家高斯(Gauss)、柯西(Cauchy)、阿贝尔(Abel)、哈密顿(Hamilton)、伽罗瓦(Calois)等.但是直到1925年出现了量子力学之后,才发现它在物理学中有许多应用.贝特(Bethe)和维格纳(Wigner)等人很快就认识到群论在物理学中的应用,把这一新的工具用于计算原子结构和光谱.利用群论方法,可以直接对体系的许多性质作出定性的了解,可以简化复杂的计算,也可以预言物理过程的发展趋向.目前在物理学和物理化学的许多分支中,群论已经成为不可缺少的工具.

§1 群的定义和例子

1.群的定义

考察所有整数的集合(set)I, $I=\{\cdots,-3,-2,-1,0,1,2,\cdots\}$,并注意此集合满足下列四个性质:(a)集合$I$的任意两元素(element)之和仍是一整数,也属此集合;(b)此集合包含一个叫做零的元素0,它具有这样的性质,对于任意元素$m\in I$,有$m+0=0+m=m$;(c)对于任意元素$m\in I$,存在一个也属于I的唯一元素n,使得$m+n=n+m=0$,显然,$n=-m$;(d)对任意m、n、$p\in I$,有$m+(n+p)=(m+n)+p$,这表示加法满足结合律.上述集合就是群的例子.

抽象地说,一些不同元素的集合,记为$G\equiv\{E,A,B,C,D,\cdots\}$,这些元素被赋予一组合法则(例如加法,乘法,矩阵乘法等),并满足下列四个性质,则这些元素的集合就称为群.

(a)G中任意两个元素A和B在给定法则下组合得到的元素

仍属于 G,即如果 $A,B\in G$,则

$$A\cdot B\in G,\qquad B\cdot A\in G \tag{1}$$

其中符号"·"表示 G 中两元素的组合. 这一性质称为群的封闭性(closure),又称集合在给定组合法则下是封闭的.

(b)存在单位元素 $E\in G$,使得对任何 $A\in G$,有

$$E\cdot A=A\cdot E=A \tag{2}$$

E 叫做单位元(unit element)或恒等元(identity element).

(c)对任意元素 $A\in G$,存在一个唯一元素 $B\in G$,使得

$$A\cdot B=B\cdot A=E \tag{3}$$

B 叫做 A 的逆(inverse element),记为 $B\equiv A^{-1}$;反之,A 也叫 B 的逆元或逆. (3)式亦可表示为

$$A\cdot A^{-1}=A^{-1}\cdot A=E \tag{3'}$$

(d)群元素的组合法则满足结合律(associative law),即对任意 A、B、$C\in G$,有

$$A\cdot(B\cdot C)=(A\cdot B)\cdot C \tag{4}$$

2. 群的阶

群中元素的个数称为群的阶(order). 包含有限个元素的群叫做有限群(finite group),包含无限多个元素的群叫做无限群(infinite group). 无限群又可分为分立群(discrete group)和连续群(continuous group). 如果群中元素的个数是可数无穷的(例如全体整数的个数),则群是分立的;如果群中元素的个数是不可数无穷的(例如全部实数的个数),则群是连续的.

3. 阿贝尔群

群元素的组合不一定是可交换的(可对易的 commutative),即一般说来,$A\cdot B\neq B\cdot A$. 若群的所有元素都相互对易,即 $A\cdot B=B\cdot A$,则此群称为阿贝尔群(Abelian group)或交换群. 上面例子中的整数加群就是阿贝尔群.

4. 两元素乘积的逆

今后我们常常用群元素的乘积或积代替"组合"这个词,并将组合的符号"·"省去,例如 $A\cdot B$ 写作 AB.

容易证明，群元素的乘积 AB 的逆 $(AB)^{-1}$ 由下式给出：

$$(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1} \tag{5}$$

事实上，根据逆元的定义(3′)式有

$$(AB)^{-1}(AB) = E$$

首先用 B^{-1}，然后用 A^{-1} 右乘上式两边，并利用(2)式，便得到(5)式.

5. 群的例子

下面我们列举几个群的例子.

(1)只包含单位元的单一点集是在乘法下的一阶群.

(2)由实数 1，-1 组成的以普通乘法作为组合法则的二阶群.

(3)由复数 $1, i, -1, -i$(其中 $i^2=-1$)组成的在乘法下的四阶群，其单位元是 1.

(4)本节开头提到的由所有实整数组成的分立无限群. 此群的组合法则是加法，其单位元是 0，逆元 $n^{-1}=-n$. 这个群是阿贝尔群.

全体偶整数(包括 0)在加法下也作成群. 同样，全体有理数、全体实数、全体复数对数的加法也各自作成群.

但是，全体非负实数在加法下不作成群. 奇整数的集合在加法下也不作成群.

(5)在乘法运算下所有正实数(0 除外)的集合是一个阿贝尔群，其单位元是 1，元素 x 的逆是它的倒数 $\frac{1}{x}$.

全体非零有理数、全体非零实数、全体非零复数对数的乘法也各自作成群.

但是，全体整数的集合在乘法下不作成群. 全体实数在乘法下也不作成群.

(6)在矩阵乘法下所有满秩的(非奇异的)n 维(n 是正整数)[方]矩阵的集合是一个矩阵群.

如两个二维方阵 $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ 和 $\begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$ 的集合是一个二阶矩阵群.

又如六个二维方阵

$$T(E)=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\quad T(A)=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix},$$

$$T(B)=\begin{bmatrix}-\frac{1}{2}&\frac{\sqrt{3}}{2}\\ \frac{\sqrt{3}}{2}&\frac{1}{2}\end{bmatrix},\quad T(C)=\begin{bmatrix}-\frac{1}{2}&-\frac{\sqrt{3}}{2}\\ -\frac{\sqrt{3}}{2}&\frac{1}{2}\end{bmatrix},$$

$$T(D)=\begin{bmatrix}-\frac{1}{2}&\frac{\sqrt{3}}{2}\\ -\frac{\sqrt{3}}{2}&-\frac{1}{2}\end{bmatrix},\quad T(F)=\begin{bmatrix}-\frac{1}{2}&-\frac{\sqrt{3}}{2}\\ \frac{\sqrt{3}}{2}&-\frac{1}{2}\end{bmatrix}$$

的集合是一个六阶矩阵群.

再如八个二维方阵

$$T(E)=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\quad T(A)=\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix},\quad T(B)=\begin{pmatrix}-1&0\\0&-1\end{pmatrix},$$

$$T(C)=\begin{pmatrix}0&-1\\1&0\end{pmatrix},\quad T(D)=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix},\quad T(F)=\begin{pmatrix}-1&0\\0&1\end{pmatrix},$$

$$T(G)=\begin{pmatrix}0&-1\\-1&0\end{pmatrix},\quad T(H)=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$$

的集合是一个八阶矩阵群.

(7)在矩阵加法下所有 $m\times n$ 阶矩阵的集合是一个群,其单位元是 $m\times n$ 阶零矩阵,而元素 A 的逆元是它的负矩阵 $-A$.

上面我们讨论的是关于标量(scalars)和矩阵(matrices)的两个基本组合法则:加法和乘法. 在数群的情形下,0 是加法单位元,而 1 是乘法单位元;在矩阵群的情形下,适当阶的零矩阵(null matrix)是加法单位元,而适当阶的单位矩阵(unit matrix)是乘法单位元. 当群组合法则是加法时,元素的逆叫加法逆元;当它是乘法时,元素的逆叫乘法逆元. 例如,若 x 是一个数,则 $-x$ 是加法逆元,而 $\frac{1}{x}$ 是乘法逆元(设 $x\neq0$);若 A 是一个矩阵,则 $-A$ 是加法逆元,A^{-1} 是乘法逆元(设 A 是非奇异的).

§2 对称性变换群

物理学家特别感兴趣的是物理系统的变换群，例如平移(translation)、转动(rotation)、反射(reflection)、置换(permutation)等. 使物理系统保持不变的变换称为系统的对称性变换(symmetry transformation). 例如，对于一个圆平面，围绕通过其中心并垂直于平面的轴的转动是它的对称变换. 在一个水分子中，两个相同原子的置换对分子来说也是对称变换.

一个系统的所有对称变换组成的群称为这个系统的对称性群(group of symmetry).

下面我们讨论几个对称性群的例子.

(1)群 S_2

设 I 代表反演(inversion)变换，它使空间任何矢量改变方向，即

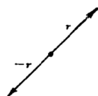


图 1-1

$$\boldsymbol{r} \xrightarrow{I} -\boldsymbol{r} \tag{1}$$

明显地，连续施行两次反演，系统将保持不变，故

$$I^2 = E \tag{2}$$

由此可得到

$$I^{-1} = I^{+} = I \tag{3}$$

可见，I 既是幺正算符(unitary operator)，又是厄密算符(Hermitian operator). (2)式表明满足封闭性条件. 单位元也存在，它就是恒等变换 E. (3)式表明逆元 I^{-1} 就是反演自身 I. 于是，E 和 I 的集合 $\{E, I\}$，即反演和恒等变换构成二阶阿贝尔群.

(2)群 C_2

设 R 代表绕 z 轴转过 π 角的转动(例如长方形绕垂直于其平面且通过中心的轴转动 π 角，如图 1—2)，而 E 代表恒等变换(即转动角为 0). 显然有 $R^2 = E$. 与上例相同，E 和 R 的集合 $\{E, R\}$ 构成二阶阿贝尔群.

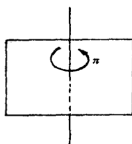


图 1-2

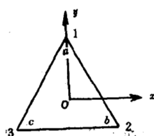


图 1-3

(3)群 C_3

设 R_1 和 R_2 分别代表绕 z 轴转过 $\frac{2}{3}\pi$ 和 $\frac{4}{3}\pi$ 的转动(例如正三角形绕垂直于其平面且通过中心的轴转动 $\frac{2}{3}\pi$ 角和 $\frac{4}{3}\pi$ 角),而 E 代表恒等变换.

为了直观起见,我们想象从一块硬纸板上切下一个正三角形,如图 1—3 所示.按图示对正三角形上各点加以标记:三个角标为 a、b、c,其中心标为 o,它与坐标原点重合.为了比较,硬纸板上与三个顶角接触的点分别标为 1,2,3.于是,我们可以形象地将以上三个对称性操作(变换)表示为:

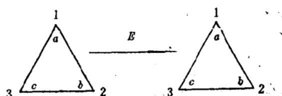


图 1-4

即恒等变换 E 使三角形的每一点都不变.

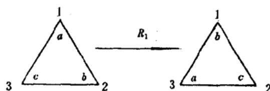


图 1-5

即变换 R_1 代表三角形绕 z 轴逆时针方向作$\frac{2}{3}\pi$ 角旋转.

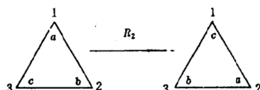


图 1-6

即变换 R_2 代表三角形绕 z 轴逆时针方向作$\frac{4}{3}\pi$ 角旋转.

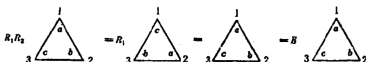
显然,这三个对称性变换的结果,除了标记 a、b、c 有所变动外,看不出正三角形有任何变化.

如果绕某轴线旋转$\frac{2\pi}{n}$角(n 是正整数)使系统保持不变,则此轴线称为系统的 n 重对称轴(n—fold symmetry axis),相应的操作记为 C_n. C_n 的整数幂也是系统的对称变换,记作 C_n^k,它表示对系统施以 k 个 C_n 操作,即绕轴转动 $k\frac{2\pi}{n}$角. 因此,在本例中,oz 轴是正三角形的三重对称轴,操作 R_1 和 R_2 可分别记为 C_3 和 C_3^2.

容易验证,E,R_1,R_2 的集合$\{E,R_1,R_2\}$构成群. 首先,我们有

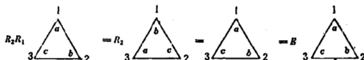
$$\left.\begin{aligned} ER_i = R_iE = R_i, \quad i = 1,2 \\ R_1R_2 = R_2R_1 = E \end{aligned}\right\} \qquad (4)$$

即封闭性条件被满足. 例如



故 $$R_1R_2 = E$$

同样



亦有 $$R_2R_1 = E$$

单位元就是恒等变换 E. 将(4)式最后一式与 § 1(3′)式对比可以看出

$$R_1^{-1} = R_2, \quad R_2^{-1} = R_1 \tag{5}$$

故逆元亦存在. 结合律条件也容易证明. 于是, 集合$\{E, R_1, R_2\}$满足定义所要求的四个性质, 此集合构成三阶阿贝尔群.

(4)群 D_3

现在我们进一步讨论正三角形的对称性变换. 上例并没有包含正三角形的全部对称变换. 现在我们考察使图形与自己重合的如下六个对称操作: $E, R_1, R_2, R_a, R_b, R_c$, 其中 E, R_1, R_2 与上例同含义. 至于元素 R_a, R_b 和 R_c, 它们各自代表正三角形绕 $o1$轴、$o2$轴和 $o3$轴转动 π 角. 例如

变换 R_a 代表三角形绕 oa 轴作 π 角旋转:

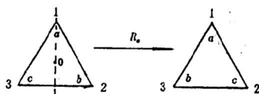


图 1-7

变换 R_b 代表三角形绕 ob 轴作 π 角旋转:

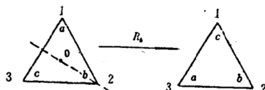


图 1-8

变换 R_c 代表三角形绕 oc 轴作 π 角旋转:

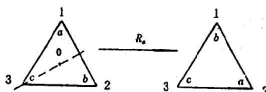


图 1-9

可以证明, 这六个对称性变换的集合构成群. 首先, 这六个操作是

封闭的.例如

R_bR_1 (triangle: 1 top; a; 3 c, b 2) $= R_b$ (1; b; 3 a, c 2) $=$ (1; a; 3 b, c 2) $= R_a$ (1; a; 3 c, b 2)

由此得 $R_bR_1 = R_a$,等等.

单位元就是恒等变换 E.

每一个操作都存在逆操作.例如

R_2R_1 (1; a; 3 c, b 2) $= R_2$ (1; b; 3 a, c 2) $=$ (1; a; 3 c, b 2) $= E$ (1; a; 3 c, b 2)

R_1R_2 (1; a; 3 c, b 2) $= R_1$ (1; c; 3 b, a 2) $=$ (1; a; 3 c, b 2) $= E$ (1; a; 3 c, b 2)

故
$$R_2R_1 = R_1R_2 = E$$
即
$$R_2^{-1} = R_1, \qquad R_1^{-1} = R_2$$
又如

R_aR_a (1; a; 3 c, b 2) $= R_a$ (1; a; 3 b, c 2) $=$ (1; a; 3 c, b 2) $= E$ (1; a; 3 c, b 2)

故
$$R_aR_a = E$$
即
$$R_a^{-1} = R_a$$
同理
$$R_b^{-1} = R_b, \qquad R_c^{-1} = R_c$$

结合律也容易证明.于是,上述六个操作的集合$\{E, R_1, R_2, R_a, R_b, R_c\}$构成一个对称性群,称为三角形的对称性变换群 D_3.它是非阿贝尔群.

(5)群 C_4

设 E, C_4, C_4^2, C_4^3 分别代表绕 z 轴转过 $0, \frac{\pi}{2}, \pi$ 和$\frac{3}{2}\pi$ 的旋转(例

如图 1－10 所示正方形绕垂直于其平面并通过中心 O 的轴沿顺时针方向转过 $0,\frac{\pi}{2},\pi$ 和 $\frac{3}{2}\pi$ 角），象讨论群 C_3 时作的规定，图中 1,2,3,4 是固定在硬纸板上的，而 a,b,c,d 标在正方形的四个角上，随正方形一起转动．类似于群 C_3 的讨论，可以证明，C_4 是正方形的四重对称轴，且这四个对称操作的集合 $\{E,C_4,C_4^2,C_4^3\}$ 构成四阶阿贝尔群．这个群中各元素的逆分别为

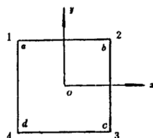


图 1-10

$$C_4^{-1}=C_4^3,\quad (C_4^3)^{-1}=C_4,\quad (C_4^2)^{-1}=C_4^2,\quad E^{-1}=E \qquad (6)$$

例如

$C_4^3C_4$ [1 a b 2 / 4 d c 3] $=C_4^3$ [1 d a 2 / 4 c b 3] $=$ [1 a b 2 / 4 d c 3] $=E$ [1 a b 2 / 4 d c 3]

由此得到 $C_4^3C_4=E$．同样可得 $C_4C_4^3=E$．对比 § 1（3′）式可知：$(C_4^3)^{-1}=C_4$，$C_4^{-1}=C_4^3$．

（6）群 C_{4v}

上例并没有包含正方形的全部对称变换．现在我们进一步研究正方形的对称变换．

图 1－11 是一正方形，其中各标记按上面的规定，即四个角标为 a,b,c,d，各边中点为 e,f,g,h；中心标为 o．1,2,3,…,8 是固定在硬纸板上而不是在正方形上．

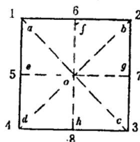


图 1-11

现在把正方形绕垂直于它并通过中心 o 的轴线转动 $\frac{\pi}{2}$，除标记 $a,b,c,\cdots,h$ 有所变动外，看不出正方形有任何变化．若考察所有这样的对称变换（例如转动和反射），它们使正方形的边界位置不发生变化，只是对点 $a,b,\cdots,h$ 给出不同的标记．表 1 列出的操

作包括了正方形的全部对称变换(对中心 o 的反演与 C_4^2 操作相同). 表中 E 记恒等操作,C_4,C_4^2,C_4^3 等操作与群 C_4 中对应操作的含义相同. 至于对平面的反射,记为 m 或 σ. "对一直线的反射"是"对过该直线并垂直于正方形的平面反射"的略语.

表 1 正方形的对称变换

符号	操作	结果
E	恒等操作	1 a b 2 4 d c 3
C_4	绕垂直于正方形并通过 O 的轴线沿顺时针方向转 90°.	1 d a 2 4 c b 3
C_4^2	绕上述轴线转 180°	1 c d 2 4 b a 3
C_4^3	绕同一轴线沿顺时针方向转 270°.	1 b c 2 4 a d 3
m_x	对直线 5—7 的反射	d c 5 7 a b
m_y	对直线 6—8 的反射	6 b a c d 8
σ_u	对直线 1—3 的反射	1 a d b c 3
σ_v	对直线 2—4 的反射	c b 2 4 d a

值得注意,表中八个变换对应于坐标轴都与正方形各边平行的笛卡儿坐标系的八种不同取法,如图 1—12 所示. 我们或者把坐标系看成固定的,正方形在变换,这就是所谓主动观点(active

viewpoint)；或者把正方形看成固定的，坐标系在变换，这就是所谓被动观点(passive viewpoint). 必须注意，主动观点中的变换相当于被动观点中的逆变换. 例如，在主动观点中，把 C_4 定义为正方形沿顺时针方向转动，在被动观点中，C_4 必表示坐标系沿逆时针方向转动同一角度. 这种约定明显地表示在图 1－12 中，今后我们将常常使用这种约定.

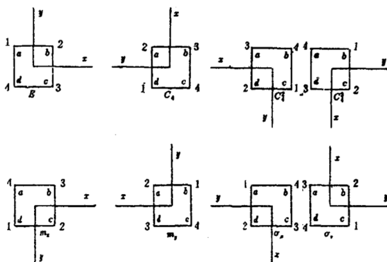


图 1-12

容易验证，表 1 列出的八个变换组成一个群，即正方形的对称性群. 例如，考察对正方形施以操作 C_4 再继之以操作 σ_μ，这可由如下得出

$$\sigma_\mu C_4 \begin{bmatrix} a & b \\ d & c \end{bmatrix} = \sigma_\mu \begin{bmatrix} d & a \\ c & b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d & c \\ a & b \end{bmatrix} = m_x \begin{bmatrix} a & b \\ d & c \end{bmatrix}$$

于是得到

$$\sigma_\mu C_4 = m_x$$

上式表明，对于正方形，操作 $\sigma_\mu C_4$ 和操作 m_x 给出相同的结果. 可见，正方形的对称变换满足封闭性条件.

体系的恒等变换就是单位元.

一个算符的逆是抵消此算符效果的算符. 例如，考虑对正方形

的逐次操作 $m_x m_x$

$$m_x m_x \begin{bmatrix} a & b \\ d & c \end{bmatrix} = m_x \begin{bmatrix} d & c \\ a & b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a & b \\ d & c \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} a & b \\ d & c \end{bmatrix}$$

由此得到 $m_x m_x = E$，故 m_x 的逆就是 m_x 自身，即

$$m_x^{-1} = m_x$$

同样可证，表 1 中八个对称变换都有逆，且就在这八个对称变换之中.

八个变换服从结合律也不难验证.

因此，表 1 所列正方形的对称变换的集合 $\{E, C_4, C_4^2, C_4^3, m_x, m_y, \sigma_\mu, \sigma_\nu\}$ 组成一个群. 在结晶学中，此正方形的八阶对称性群记为 C_{4v}. 它是非阿贝尔群.

(7)群 D_4

如果图 1－11 中的四个反射操作用图中四条虚线为轴分别转动 π 角代替，则将得到群 D_4，此群也是正方形的对称性群，包含八个元素 $\{E, C_4, C_4^2, C_4^3, C_{57}, C_{68}, C_{13}, C_{24}\}$，其中 C_{57} 表示绕直线 5－7 的二重转动，等等.

(8)置换群 S_n

作为对称性群的另一个例子，我们来讨论置换群. 它在全同粒子的量子力学中很重要. 试考察 n 个全同对象的系统. 当我们交换其中任意两个或多个对象时，所得到的组态(configuration)与原来的组态没有区别. 我们可以把每一交换看作对系统的一个变换，所有可能的变换的集合组合一个群. 在此群作用下系统保持不变. 因为 n 个对象共有 $n!$ 个置换(排列)，所以 n 个对象的全部置换的集合构成 $n!$ 阶置换群 (permutation group) 或 n 次对称群 (the symmetric group of degree n). 通常记为 S_n.

每一个置换 P 可记为

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \cdots & n \\ P_1 & P_2 & P_3 & \cdots & P_n \end{pmatrix} \tag{7}$$

它表示第 i 个对象被第 P_i 个对象所置换. 例如下列两个置换是全

同的：

$$\begin{pmatrix}1 & 2 & 3\\ 2 & 3 & 1\end{pmatrix} \quad 和 \quad \begin{pmatrix}3 & 1 & 2\\ 1 & 2 & 3\end{pmatrix}$$

因此，(7)式中第一排是否按自然数的顺序(in natural order)排列是无关紧要的．在每一列中，第一行的对象被第二行的对象所置换．显然，P 的逆 P^{-1}应为

$$P^{-1}=\begin{pmatrix}P_1 & P_2 & P_3 & \cdots & P_n\\ 1 & 2 & 3 & \cdots & n\end{pmatrix} \tag{8}$$

下面以 $n=3$ 为例．群 S_3 有 $3!=6$ 个置换，它们是

$$\left.\begin{aligned}
E&=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3\\ 1 & 2 & 3\end{pmatrix}, & P_1&=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3\\ 2 & 1 & 3\end{pmatrix},\\
P_2&=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3\\ 1 & 3 & 2\end{pmatrix}, & P_3&=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3\\ 3 & 2 & 1\end{pmatrix},\\
P_4&=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3\\ 2 & 3 & 1\end{pmatrix}, & P_5&=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3\\ 3 & 1 & 2\end{pmatrix}
\end{aligned}\right\} \tag{9}$$

两个置换 P_iP_j 的乘积，表示对系统进行连续两次置换(先进行 P_j 后进行 P_i)，结果是系统的另一个置换 P_k，记为 $P_k=P_iP_j$．例如

$$\begin{aligned}
P_1P_2&=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3\\ 2 & 1 & 3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 2 & 3\\ 1 & 3 & 2\end{pmatrix}\\
&=\begin{pmatrix}1 & 3 & 2\\ 2 & 3 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 2 & 3\\ 1 & 3 & 2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3\\ 2 & 3 & 1\end{pmatrix}=P_4
\end{aligned}$$

作为练习，读者可以求出其余两置换的乘积，并验证这六个置换的集合构成六阶置换群 S_3．

§3 乘 法 表

1. 乘法表

群的两个元素 A 与 B 相乘的结果 $AB=C$ 用群的乘法表(group multiplication table)来表示是方便的．乘法表的行(rows)和列(columns)用群元素标记，元素 A 和 B 的乘积 $C=AB$ 出现在 A

行和 B 列交叉处，操作的顺序由右至左，AB 中 B 是第一操作(first operation)，A 是第二操作(second operation)．在作乘法表时，行和列的次序是无关紧要的，可以选取第一列的每一个元素按第一行每一个相应元素的次序排列，例如表 2；也可以对行和列选取不同的次序，使第一列的每一个元素是第一行相应元素的逆，照此方式写出的乘法表，主对角线只含单位元 E，例如表 3.

表 2

$A \backslash B$	1	-1	i	$-i$
1	1	-1	i	$-i$
-1	-1	1	$-i$	i
i	i	$-i$	-1	1
$-i$	$-i$	i	1	-1

表 3

$A \backslash B$	1	-1	i	$-i$
1	1	-1	i	$-i$
-1	-1	1	$-i$	i
$-i$	$-i$	i	1	-1
i	i	$-i$	-1	1

按照后一种排列方式，我们作出 C_{4v} 群的乘法表如表 4.

表 4 群 C_{4v} 的乘法表

第二操作	第一操作							
	E	C_4	C_4^2	C_4^3	m_x	m_y	σ_u	σ_v
E	E	C_4	C_4^2	C_4^3	m_x	m_y	σ_u	σ_v
C_4^3	C_4^3	E	C_4	C_4^2	σ_v	σ_u	m_x	m_y
C_4^2	C_4^2	C_4^3	E	C_4	m_y	m_x	σ_v	σ_u
C_4	C_4	C_4^2	C_4^3	E	σ_u	σ_v	m_y	m_x
m_x	m_x	σ_v	m_y	σ_u	E	C_4^2	C_4^3	C_4
m_y	m_y	σ_u	m_x	σ_v	C_4^2	E	C_4	C_4^3
σ_u	σ_u	m_x	σ_v	m_y	C_4	C_4^3	E	C_4^2
σ_v	σ_v	m_y	σ_u	m_x	C_4^3	C_4	C_4^2	E

群 D_3 的群表如表 5.

表 5　群 D_3 的乘法表

	E	R_a	R_b	R_c	R_1	R_2
E	E	R_a	R_b	R_c	R_1	R_2
R_a	R_a	E	R_2	R_1	R_c	R_b
R_b	R_b	R_1	E	R_2	R_a	R_c
R_c	R_c	R_2	R_1	E	R_b	R_a
R_1	R_1	R_b	R_c	R_a	R_2	E
R_2	R_2	R_c	R_a	R_b	E	R_1

置换群 S_3 的群表如表 6.

表 6　群 S_3 的乘法表

	E	P_1	P_2	P_3	P_4	P_5
E	E	P_1	P_2	P_3	P_4	P_5
P_1	P_1	E	P_4	P_5	P_2	P_3
P_2	P_2	P_5	E	P_4	P_3	P_1
P_3	P_3	P_4	P_5	E	P_1	P_2
P_4	P_4	P_3	P_1	P_2	P_5	E
P_5	P_5	P_2	P_3	P_1	E	P_4

2. 重排列定理

由表 2,3,4 和 5 都可看出,群的每一个元素在表中每一行或每一列必出现而且仅出现一次,这就是所谓重排列定理(rearrengement theorem). 每一行(列)的元素只是另一行(列)元素的重新排列.

为了证明此定理,我们首先证明一个元素不可能在一行或一列出现一次以上. 设有一个元素 D 在对应于元素 A 的列中出现两次,这就意味着存在两个元素 B 和 C,使得

$$BA = D \quad 和 \quad CA = D$$

以 A^{-1}右乘上式得

$$B = DA^{-1}, \quad C = DA^{-1}$$

即 $B=C$，但这与群元素互不相同的假设矛盾. 同理可证没有一个元素可以在一行中出现一次以上.

既然不可能有元素在一行或一列中出现一次以上，而每一行或每一列的位置的数目等于群的阶（即群元素的个数），所以可以断言，每一元素必在每行或每列出现一次且仅一次.

3. 循环群和有限的群的生成元

从表 2 或表 3 可以看出，群 $\{1,-1,i,-i\}$ 具有循环性质（cyclic property），即群的所有元素能够由某一元素的幂得到. 例如，群的四个元素可由 $i^k(k=0,1,2,3)$ 得到.

如果群 G 的每一个元素都是 G 的某一固定元素 A 的幂 A^k（k 是整数），则称 G 为循环群（cyclic group）；或者说，G 是由元素 A 生成的，而元素 A 就称为 G 的一个生成元（generator）. 循环群 G 可表为 $G=\{A,A^2,A^3,\cdots,A^{n-1},A^n=E\}$，其阶为 n.

一个群的生成元不是唯一的，它们可以有不同的选取方法. 例如群 $\{1,-1,i,-i\}$ 也可由 $-i$ 生成.

显而易见，循环群一定是阿贝尔群，但其逆不一定对.

§4　共轭元素和类

1. 共轭元素

设 A、B 和 C 是群的元素，如果它们满足下列关系

$$C=A^{-1}BA, \tag{1}$$

则称元素 C 与元素 B 共轭（conjugate），这种运算叫做 B 通过 A 的相似变换. 显然

$$B=ACA^{-1} \tag{2}$$

由表 4 可以看出，例如

$$m_x=C_4^{-1}m_yC_4$$

故 m_x 与 m_y 互为共轭.

可以证明，如果 B 与 C 共轭，B 又与 D 共轭，则 C 与 D 共轭，这时三者相互共轭. 事实上，若

$$B = A^{-1}CA \rightarrow C = ABA^{-1}$$

$$B = F^{-1}DF$$

则有

$$C = ABA^{-1} = AF^{-1}DFA^{-1} = (FA^{-1})^{-1}D(FA^{-1}) = G^{-1}DG$$

其中利用了$(FA^{-1})^{-1}=(A^{-1})^{-1}F^{-1}=AF^{-1}$，且记$FA^{-1}=G$.

2. 类

我们可以把群分成一些集合，使得每一集合中的所有元素都相互共轭，但属于不同集合的两元素互不共轭. 群中彼此相互共轭的元素的集合叫做群的共轭类(conjugate classes)或简称为类. 显然，不同类的两元素互不共轭.

在任何群中，单位元E自成一类，这是因为对于群中任意元素A，必有$A^{-1}EA=E$，即单位元与自身共轭，故自成一类.

阿贝尔群的每一个元素自成一类.

作为练习，读者可证明，群C_{4v}的类是

$$(E),(C_4,C_4^3),(C_4^2),(m_x,m_y),(\sigma_\mu,\sigma_\nu) \tag{3}$$

对于由物理系统的旋转、反射和反演所组成的变换群，有一些简单规则可以决定群的类而不需要对所有元素进行具体计算. 这些规则是：

(1)转动角大小不等的旋转一般说来属于不同的类. 例如，群C_{4v}的C_4和C_4^2属于不同的类.

(2)绕一轴线沿顺时针方向旋转某一角度和绕同一轴线沿逆时针方向旋转同一角度在如下条件下属于同一类，即群中存在这样的变换，它能倒转轴线方向或改变笛卡儿坐标系的指向(就是把右手坐标系变为左手坐标系，或反之). 例如，群C_{4v}的C_4和C_4^3属于同一类，因为有一个反射(如m_x或σ_μ)可改变坐标系的指向. 但在群C_3中，其元素R_1和R_2则不是同一类，虽然R_1是绕主对称轴旋转$\frac{2}{3}\pi$，而R_2则是绕同一轴旋转$\frac{4}{3}\pi$，即逆转$\frac{2}{3}\pi$，但群C_3中没有元素能使该轴倒转方向，故R_1和R_2属于不同的类. 事实上，群C_3

是阿贝尔群，各个元素自成一类.

(3)绕两不同轴线旋转同一角度或对两不同平面的反射属于同一类，当且仅当两轴线或两平面可通过群中元素由其中一个变到另一个. 例如，群 C_{4v}中，m_x 和 m_y 属于同一类，因为图 1－11 中直线 5－7 可以由操作 C_4 变到直线 6－8；但 σ_μ 与 m_x 不属同一类，因为没有一个操作可以把直线 1－3 变到直线 5－7.

这些简单的判据对于凭观察得到分子和晶体点群(point group)的类很有用.

§5 子　　群

1. 子群

如果群 G 中的某些元素的集合 H 自身也是一个群(与 G 具有相同的组合法则)，则 H 叫做群 G 的一个子群(subgroup).

例如，从表 4 中容易看出，$\{E,C_4,C_4^2,C_4^3\}$是群 C_{4v}的一个子群，也就是说，群 C_4 是群 C_{4v}的一个子群. 此外，$\{E,C_4^2,m_x,m_y\}$，$\{E,C_4^2,\sigma_\mu,\sigma_\nu\}$，$\{E,C_4^2\}$，$\{E,m_x\}$，$\{E,m_y\}$，$\{E,\sigma_\mu\}$，$\{E,\sigma_\nu\}$都是群 C_{4v}的子群.

单位元自身和群 G 自身也是群 G 的子群，称为平凡子群(trivial subgroup).

如果 G 比 H 包含有更多的元素，则子群 H 称为群 G 的真子群.

由 § 4(3)式可知，在群 C_{4v}中，C_4 和 C_4^3 属同一类，m_x 和 m_y 属同一类，σ_μ 和 σ_ν 也属同一类；但在子群 $C_4=\{E,C_4,C_4^2,C_4^3\}$和 $H=\{E,C_4^2,m_x,m_y\}$中，每一个元素自成一类，即 C_4 和 C_4^3 不再属同一类，m_x 和 m_y 也不再属同一类. 这是因为在子群 C_4 中没有改变坐标轴方向的操作，而在子群 H 中，则不存在把 x 轴变到 y 轴的操作. 因此应当注意，在一个较大的群中属于同一类的元素，在一个较小的群中不一定属于同一类.

2. 陪集

若 g 阶群 G 有一个 h 阶子群 $H=\{H_1=E_1,H_2,H_3,\cdots H_h\}$. 设

X 为 G 中任一元素，构造所有像 XE, XH_2, XH_3 等等的乘积，并把它们的集合记为

$$XH = (XE, XH_2, XH_3, \cdots, XH_h) \tag{1}$$

考察两种情况：(1) X 在子群 H 中，(2) X 不属于 H. 如果 X 是 H 的元素，根据群的定义，集合 XH 必与群 H 恒等，因为集合 XH 仅仅是把 H 中的元素重新排列而已. 我们把这种情况记为

$$XH = H, \quad 若 X \in H \tag{2}$$

例如，用元素 C_4 乘群 $H=\{E, C_4, C_4^2, C_4^3\}$ 中每一元素，得 $C_4H=\{C_4, C_4^2, C_4^3, E\}$，故 $XH=H$，这是因为 $C_4 \in H$.

反之，若 X 不属于 H，则可证 XH 的元素都不属于 H. 例如，$m_xH=\{m_x, \sigma_v, m_y, \sigma_\mu\}$，$m_yH=\{m_y, \sigma_v, m_x, \sigma_\mu\}$，显然 m_xH 和 m_yH 中的元素都不属于 H，这是因为 m_x 和 m_y 都不属于 $H=\{E, C_4, C_4^2, C_4^3\}$ 之故.

我们用反证法来证明以上结论.

设对于某一值 $i(1 \leqslant i \leqslant h)$，$XH_i$ 属于 H，因 H 是一个群，H_i^{-1} 也属于此群，从而 $(XH_i)H_i^{-1}=X$，根据群的封闭性，X 也在 H 中. 但这与 X 不是 H 的元素相矛盾，这就证明了 XH 中的元素都不属于 H，即 H 和 XH 没有公共元素. 我们把 H 和 XH 叫做不相交集(disjoint sets).

当 X 不是子群 H 的元素时(当然还是全群 G 的元素)，集合 XH 叫做 G 中子群 H 的相对于 X 的左陪集(left coset). 类似地，也可以把下列元素的集合定义为 G 中 H 的相对于 X 的右陪集(right coset).

$$HX = (EX, H_2X, H_3X, \cdots, H_hX) \tag{3}$$

显然，子群 H 的左陪集 XH 和右陪集 HX 都与 H 不相交，即子群与它的陪集没有公共元素. 可以证明，子群 H 的任意两个左陪集或者包含全部相同的元素，或者没有公共元素. 因为 X 和 H_i 都属于较大的群 G，故所有左陪集和右陪集的元素自然都属于 G.

3. 正规子群

对于群 G 中所有元素 X，子群 H 的左陪集与右陪集相同，则

H 叫做 G 的正规子群(normal subgroup)或不变子群(invariant subgroup).

H 是正规子群的条件可写成

$$XH = HX \quad 或 \quad X^{-1}HX = H, \qquad 所有 X \in G \tag{4}$$

例如群 C_{4v} 的子群 $H=\{E,C_4,C_4^2,C_4^3\}$ 是正规子群,因为

$$m_xH = (m_x, \sigma_v, m_y, \sigma_\mu)$$

$$Hm_x = (m_x, \sigma_\mu, m_y, \sigma_v)$$

故有 $m_xH=Hm_x$. 对 m_y,σ_μ,σ_v,亦有相同的结果. 所以,$H=\{E,C_4,C_4^2,C_4^3\}$ 是群 C_{4v} 的正规子群.

(4)式也可以改述为要求 XH 中的每一个元素等于 HX 中的某一元素,即

$$XH_i = H_jX \quad 或 \quad X^{-1}H_jX = H_i \tag{5}$$

由上式可知,H_i 与 H_j 互为共轭,它表明如果 H_i 属于 G 中的正规子群 H,则与 H_i 共轭的所有元素也属于 H. 由此可见,正规子群由较大群的完全类(complete classes)组成. 反之亦对,即如果一个子群 H 由 G 的完全类组成,则 H 是 G 的正规子群. 这是正规子群定义的另一形式. 例如,$\{E,C_4^2,m_x,m_y\}$ 是群 C_{4v} 的一个正规子群,因为它由三个完全类组成(参阅 § 4(3)式),但 $\{E,m_x\}$ 则不是正规子群.

4. 商群

试考虑群 C_{4v} 的一个正规子群,例如 $K_1=\{E,C_4^2\}$. 现在用 C_{4v} 的其余元素组成子群 K_1 的所有不同陪集,可得 $K_2=(C_4,C_4^3)$, $K_3=(m_x,m_y)$, $K_4=(\sigma_\mu,\sigma_v)$. 于是,连同正规子群 K_1 在内,共有

$$K_1 = \{E,C_4^2\}, \quad K_2 = (C_4,C_4^3)$$

$$K_3 = (m_x,m_y), \quad K_4 = (\sigma_\mu,\sigma_v) \tag{6}$$

以上的正规子群以及它的所有陪集的集合可以构成一个群,只要这样来定义(6)式中两两的乘积 $K_iK_j(i\neq j, i,j=1,2,3,4)$,其意义是 K_i 的每一元素与 K_j 各元素乘积的集合,但重复的元素只算一次. 一般说来,两两乘积与次序有关. 现在我们考虑

$$K_2K_3 = (C_4,C_4^3)(m_x,m_y)$$

$$=(\sigma_\mu,\sigma_\nu,\sigma_\nu,\sigma_\mu)$$

$$\rightarrow(\sigma_\mu,\sigma_\nu)=K_4 \qquad (7)$$

还有其他的类似关系.可见集合 $K=(K_1,K_2,K_3,K_4)$对上面定义的乘法是封闭的.同样可以证明,此集合也满足所有关于群的其他要求.因此,我们也可以把每一个 K_i 看作"元素",则其集合 K 是在给定组合法则下的一个群.这个群叫做 G 的相对于正规子群 K_1 的商群(factor group or quotient group).

更一般地,如果 H 是 G 的一个正规子群,H 在 G 中的所有不同的陪集在上面定义的陪集乘法运算下叫做 G 相对于 H 的商群,并记为

$$K=G/H$$

若 g 和 h 别为 G 和 H 的阶,则 K 的阶等于 g/h.

5.拉格朗日定理

若 h 阶群 H 是 g 阶群 G 的一个子群,则 g 是 h 的整数倍,这就是拉格朗日定理(Lagrange's theorem).整数 g/h 叫做群 G 中子群 H 的指数(index).

拉格朗日定理证明如下.考虑 H 的所有不同的陪集 X_1H, $X_2H,\cdots X_{n-1}H$(为了方便,设 H 有 $n-1$ 个陪集).若 h 是群 H 的阶,则每一个陪集有 h 个元素,例如 $X_1H=(X_1E,X_1H_2,X_1H_3,\cdots,X_1H_h)$,等等.但是,群 G 的每一个元素必然或者出现在 H 中,或者出现在$(n-1)$个不同的陪集中,这是因为子群与它的陪集不相交,即没有公共元素之故.这样,G 中没有一个元素能够在 H 或其$(n-1)$个陪集中出现多于一次.因此,H 中的 h 个元素加上$(n-1)$个陪集中的$(n-1)h$ 个元素之和必等于 G 中的 g 个元素,即

$$g=h+(n-1)h=nh \qquad (9)$$

其中 n 是正整数.

§6 群的直积

1.群的直积

设 $H=\{H_1\equiv E, H_2, H_3, \cdots, H_h\}$是 h 阶群，$K=\{K_1\equiv E, K_2, K_3, \cdots, K_k\}$是 k 阶群，如果 H 和 K 除单位元 E 外没有公共元素，且 H 中的每一元素与 K 中每一元素对易，则我们可以定义两群 H 和 K 的直积群(direct product group)G，其阶为 $g=hk$，其元素是 H 的每一元素与 K 的每一元素的积，即

$$G = H \otimes K = \{E, EK_2, EK_3, \cdots, EK_k; H_2E, H_2K_2, H_2K_3, \cdots, H_2K_k; \cdots, H_hE, H_hK_2, H_hK_3, \cdots, H_hK_k\} \quad (1)$$

由上式可以看出，H 和 K 都是 G 的子群，因为 H 和 K 的每一个元素都被包含在 G 中.

群 C_{4v}的子群可作为这一概念的简单例子. 例如

$$\left.\begin{aligned}
\{E,\sigma_\mu\} \otimes \{E,\sigma_\nu\} &= \{E,C_4^2,\sigma_\mu,\sigma_\nu\} \\
\{E,m_x\} \otimes \{E,m_y\} &= \{E,C_4^2,m_x,m_y\} \\
\{E,C_4^2\} \otimes \{E,m_x\} &= \{E,C_4^2,m_x,m_y\} \\
\{E,C_4^2\} \otimes \{E,\sigma_\mu\} &= \{E,C_4^2,\sigma_\mu,\sigma_\nu\}
\end{aligned}\right\} \quad (2)$$

作群的直积是扩大群的最简单的方法. 在研究原子、分子、晶体、原子核和基本粒子的对称性时，群的直积是一个重要的概念和工具. $C_{2h}=C_2\otimes S_2$ 可作为一个例子. 反演操作与所有旋转操作是可对易的，即

$$IRr = Ir' = -r'$$
$$RIr = R(-r) = -r'$$

由此可见 $IR=RI$. 用 σ 记之，它表示对 xy 平面的反射操作，即是改变 z 轴方向的操作. 群 $C_{2h}=\{E,R,I,\sigma\}$的乘法表如表 7.

表 7　群 C_{2h}乘法表

	E	R	I	σ
E	E	R	I	σ
R	R	E	σ	I
I	I	σ	E	R
σ	σ	I	R	E

2. 直积群的类结构

设群 H 的元素记为 $H_a, H_b, H_c, \cdots$，群 K 的元素记为 $K_a, K_b, K_c, \cdots$，如果

$$H_d = H_f^{-1}H_bH_f, \quad K_c = K_e^{-1}K_aK_e \tag{3}$$

则

$$H_dK_c = (H_f^{-1}H_bH_f)(K_e^{-1}K_aK_e)$$

注意到 H 的元素与 K 的元素对易，则上式可变为

$$\begin{aligned} H_dK_c &= K_e^{-1}H_f^{-1}H_bK_aH_fK_e \\ &= (H_fK_e)^{-1}H_bK_a(H_fK_e) \end{aligned} \tag{4}$$

即

$$G_i = G_l^{-1}G_jG_l \tag{4'}$$

由(3)式和(4)式可见，如果 H 中 H_d 与 H_b 共轭，K 中 K_c 与 K_a 共轭，则在直积群 $H \otimes K = G$ 中，H_dK_c 与 H_bK_a 共轭. 因此，直积 $H \otimes K$ 的一类包含所有这样的乘积 H_dK_c，其中 H_d 遍及 H 的一个类，K_c 遍及 K 的一个类. 因此，H 中的一个类和 K 中的一个类组成直积群 $H \otimes K$ 的一个类.

若群 H 的类数为 n_h，群 K 的类数为 n_k，则直积群 $G = H \otimes K$ 的类数 n_g 为

$$n_g = n_h \cdot n_k \tag{5}$$

例如 $\{E, \sigma_\mu\}$ 中每一元素自成一类，$\{E, \sigma_\nu\}$ 中每一元素自成一类，故直积群 $\{E, \sigma_\mu\} \otimes \{E, \sigma_\nu\} = \{E, C_4^2, \sigma_\mu, \sigma_\nu\}$ 有四类，即每一元素自成一类.

§7 同构和同态

群的乘法表，例如表 4 所示的正方形群的乘法表，刻划了群的全部特征，也包含了关于群的解析结构的全部知识. 具有相似的乘法表的所有群都有相同的结构——它们称为相互同构(isomorphism).

从数学上说，如果有相同阶 g 的两个群 $G = \{E, A, B, C, \cdots\}$ 和

$G'=\{E,A',B',C',\cdots\}$，G 和 G' 的元素之间存在着一一对应(one－to－one correspondence) $A\leftrightarrow A'$，$B\leftrightarrow B'$，$C\leftrightarrow C'$ 等等，使得如果 $AB=C$，则有 $A'B'=C'$，我们就说 G 与 G' 同构．因此，只要简单地把 G 的乘法表中 G 的元素用 G' 的相应元素代替，即可由 G 的乘法表得到 G' 的乘法表．必须注意，在同构映射下，一个群的单位元对应于另一个群的单位元，如图 1－13 所示．群 G' 常称为群 G 的同构象(image)或映射(mapping)，并记为 $G'\approx G$．同构具有传递性：如果 $G\approx G'$，$G'\approx G''$，则，$G\approx G''$；也具有反身性：如果 $G\approx G'$，则 $G'\approx G$．

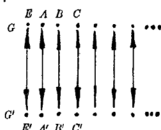


图 1-13

作为例子，考虑数群$\{1,i,-1,-i\}$与群 $G=\{E,C_4,C_4^2,C_4^3\}$，它们在下述映射下同构：

$$1\leftrightarrow E,\quad i\leftrightarrow C_4,\quad -1\leftrightarrow C_4^2,\quad -i\leftrightarrow C_4^3$$

例如，一个群的积$(-1)(-i)=i$，对应于另一个群的积 $C_4^2C_4^3=C_4$ 等等．

经常碰到多一对应(many－to－one correspondence)的映射．如果群 G_1 的每一个元素 A 对应于另一群 G_2 的一个唯一确定的元素 $\varphi(A)$，使得

$$A\to\varphi(A),\qquad B\to\varphi(B)\tag{1}$$

而且

$$AB\to\varphi(A)\varphi(B)=\varphi(AB)\tag{2}$$

或

$$AB=C\to\varphi(A)\varphi(B)=\varphi(C)\tag{2'}$$

就说存在着从 G_1 到 G_2 的同态(homomorphism)．G_2 的元素 $\varphi(A)$ 叫做在同态下 G_1 的元素 A 的像(image)或映象(map)．虽然 G_1 的每一元素 A 映射到 G_2 的唯一元素 $\varphi(A)$，但 G_1 的几个元素可以映射到 G_2 的同一元素，因此，即使 $A\neq B$，也可能有 $\varphi(A)=\varphi(B)$．如果 G_1 中有 n 个元素映射到 G_2 的一个元素，我们就说存在着一个由 G_1 到 G_2 的 n 对 1 的映射或同态，如图 1－14 所示．显然，若 $n=1$，

映射简化为同构.

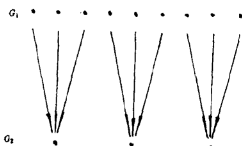


图 1-14

若群 G_1 和 G_2 都是有限群，且有相同的阶，则两者同态就必自动地同构. 若阶数不同，$N_{G1}>N_{G2}$，则在最好的情形下也只存在同态.

群 C_{4v} 又提供了同态的简单例子. 例如，子群 $\{E,m_x\}$ 和子群 $\{E, C_4^2, m_x, m_y\}$ 若按如下 2 对 1 的映射时是同态的：

$$E, C_4^2 \to E; \quad m_x, m_y \to m_x \tag{3}$$

单位元提供了同态的一个平凡例子，因为存在着从在一群 G 到只包含单位元的一阶群的同态. 而后者又是一群的正规子群.

我们已经指出，彼此同构的群具有相同的解析结构. 彼此同构的群可以代表完全不同的物理状况. 但是，从数学角度看，只要研究其中之一就可以了. 我们的整个理论是以群的四个基本公理为基础的，它们与群元素的特定含意完全无关. 因此，这部分理论叫做抽象群理论(abstract group theory). 我们可以根据具体物理状况的需要，给群元素以任一解释，并得出相应的结果.

第二章　希尔伯特空间

希尔伯特空间是建立量子力学的数学框架. 物理可观察量用希尔伯特空间中的算符表示，而物理态是希尔伯特空间中的矢量(函数). 描述物理系统中可能状态的函数最重要的性质是它们形成一个完备集(complete set). 整个量子力学是建立在这一事实的基础之上的.

当把函数看作一个矢量空间中的矢量时，数学的一些主要分支——代数、几何和分析就汇合起来了. 它与近代物理有着广泛的联系.

本章将讨论希尔伯特空间和算符的概念，为群论在量子力学中的应用准备基础.

§1　矢量空间

人们熟悉的三维空间是任意维矢量空间这一普遍概念的一个特例. n 维空间(n 是一个有限的实正整数或无限大)这一纯粹抽象的概念，实际上已经成为现代物理和数学的许多问题中的基本概念.

1. 域

在介绍矢量空间之前，先给"域"下一定义. 令 F 是某些元素的集合$(a,b,c,d,\cdots)$，并假定对 F 的元素定义了两个二元运算：一个用"＋"表示(称为加法)，而另一个用"·"表示(称为乘法). 当下列条件成立时，称 F 是一个域(field)：

(1)F 在加法下是一个阿贝尔群，其单位元以"0"表示，并读作零(zero)；

(2)F 的非零元素的集合在乘法下也构成一个阿贝尔群，其单

位元以“1”表示，并读作 1(unity)；

(3)乘法对加法满足分配律：

$$a(b+c)=ab+ac$$

下面是域的三个例子：

(a)所有实数的集合，通常记为 R.

(b)所有复数的集合，通常记为 C.

(c)所有有理数的集合，通常记为 Q.

域的元素称为数量(标量).

2. 矢量空间

当下述两个条件成立时，称元素 $u,v,w,\cdots$ 的集合 L 为域 F 上的矢量空间(vector space)[①]：

(1)在 L 中定义了一个加法运算，记为“+”，L 在加法下是一阿贝尔群. 此群的单位元记作 $\mathbf{0}$(null element).

显然，

$$u+v=w\in L \tag{1}$$

(2)域 F 的任一数与 L 的任一元可被一称为数乘的运算结合成 L 的一个元，使得对任意 $u,v\in L$ 和 $a,b\in F$，有

$$\begin{aligned} a(u+v) &=(au+av)\in L \\ (a+b)u &=(au+bu)\in L \\ a(bu) &=(ab)u \\ 1u=u, &\quad 0u=\mathbf{0} \end{aligned} \tag{2}$$

值得注意，式中 0 是域上的元素，而 $\mathbf{0}$ 是 L 的“零”元. 此后我们将不区分 0 和 $\mathbf{0}$ 这两个零.

矢量空间的元素称为矢量(vectors). 矢量空间中两个元素的乘法不一定要加以定义. 若定义了两元素的内积运算，则矢量空间成为内积空间，见 § 2.

矢量空间的例子：

(a)实数域上的三维位置矢量空间，用精确的数学语言应陈述

---

① 矢量空间，线性矢量空间和线性空间等名称同义.

为“具有通常矢量加法运算和矢量乘以数量(标量)的运算的所有位置矢量的集合”.

(b)在某一域上全体 n 数组(n—triplets of numbers)的集合.例如 $u\equiv(\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3,\cdots,\alpha_n)$,其中 α_i 属于该域.因而,所有复数 n 数组的集合是 C 上的矢量空间;所有实数 n 数组的集合是 R 上的矢量空间;所有有理数 n 数组的集合是 Q 上的矢量空间.

这种集合中的两个元素 u 与 $v\equiv(\beta_1,\beta_2,\cdots,\beta_n)$,当且仅当对所有的

$$\alpha_i=\beta_i \quad (1\leqslant i\leqslant n) \tag{3a}$$

时,称作相等,记为 $u=v$

这种集合中两个元素 u 和 v 的加法及矢量与数的乘法定义为

$$(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_n)+(\beta_1,\beta_2,\cdots,\beta_n)=(\alpha_1+\beta_1,\alpha_2+\beta_2,\cdots,\alpha_n+\beta_n) \tag{3b}$$

$$c(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_n)=(c\alpha_1,c\alpha_2,\cdots,c\alpha_n) \tag{3c}$$

此外,若所有

$$\alpha_i=0 \quad (1\leqslant i\leqslant n) \tag{3d}$$

则称 $u=0$.

显然,例(a)是本例的一个特殊情况——它是所有实数 3 数组的集合.

(c)所有实数的集合.

(d)所有复数的集合.

(e)所有有理数的集合.

在这最后三个例子中,数和矢量相同.

定义在实数域上的矢量空间称为实矢量空间;而定义在复数域上的矢量空间称为复矢量空间.

§2 内积空间

1.内积空间

定义在域 F 上的矢量空间 L(这里的 F 或者是复数域,或者

是实数域)，除了满足矢量空间的定义条件(1)和(2)外，它的元素还满足下述条件(3)时，称为内积空间(inner product space)：

(3)对于每一对元素 $u,v\in L$，都有域 F 的一个确定的数与之对应，记作 $(u,v)=c$，并称为 u 和 v 的内积或数积(标积)，并且具有以下性质：

$$\left.\begin{aligned} &(u,v)=(v,u)^* \\ &(w,au+bv)=a(w,u)+b(w,v) \\ &(u,u)\geqslant 0\text{，当且仅当 } u=0 \text{ 时等号成立} \end{aligned}\right\} \quad (1)$$

式中星号 * 表示取复数共轭. 由定义(1)式立即可推出：

$$\left.\begin{aligned} &(au,v)=(v,au)^*=a^*(v,u)^*=a^*(u,v) \\ &(au,bv)=a^*b(u,v) \end{aligned}\right\} \quad (2)$$

我们也可以说，定义了内积的矢量空间称为内积空间. 具有实内积的实矢量空间叫做欧几里得空间(Euclidean space)；而复内积空间则称为幺正空间(unitary space).

所有复数 n 数组的线性空间将成为一个内积空间，如果我们定义两元素 u 和 v 的数积如下：

$$(u,v)=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i^*\beta_i \quad (3)$$

一般说来，上式是一复数.

2. 模

矢量 u 同它自身的内积，由(3)式得

$$(u,u)=\sum_{i=1}^{n}|\alpha_i|^2 \quad (4)$$

式中| |代表所夹数的绝对值，即 $|\alpha_i|$ 是 α_i 的绝对值. (4)式是一个大于零的实数，称为矢量的模方，记作

$$\|u\|^2\equiv(u,u) \quad (5)$$

模方的正平方根称为矢量的模(norm)，又称矢量的长度(length)，记为 $\|u\|$，即

$$\|u\|=(u,u)^{1/2}=\Big(\sum_{i=1}^{n}|\alpha_i|^2\Big)^{1/2} \quad (6)$$

模为一的矢量称为归一化矢量.

3. 矢量的正交归一集

如果两个矢量 u 和 v 的内积为零，即

$$(u,v) = 0 \tag{7}$$

我们就说这两矢量正交(orthogonal).

如果所有矢量 $u_1,u_2,u_3,\cdots$ 彼此正交，而每一个矢量又归一化为单位长度，则这些矢量的集合 $\{u_1,u_2,u_3,\cdots\}$ 称为正交归一集(orthonormal set)，即如果

$$(u_i,u_j) = \delta_{ij} \tag{8}$$

则矢量的集合 $\{u_1,u_2,u_3\cdots\}$ 是正交归一集. 在笛卡儿空间中，三个单位矢量集 $\{e_i\}$ 构成一个正交归一集.

4. 模的几个性质

下面我们介绍模的几个性质：

(1) $\|u\| \geqslant 0$，当且仅当 $u=0$ 时 $\|u\|=0$ (9)

这个性质根据(5)式和(1)式中第三式容易证明.

(2) $\|au\| = |a| \cdot \|u\|$ (10)

这个性质根据(5)式和(1)式中第二式即可证明：

$$\begin{aligned}\|au\| &= (au,au)^{1/2} = [a^* a(u,u)]^{1/2} \\ &= |a| \cdot \|u\|\end{aligned}$$

(3)贝塞尔(Bessel)不等式

如果 $\{u_1,u_2,\cdots,u_n\}$ 是内积空间中的任意有限的正交归一集，u 是任一矢量，则有

$$\|u\|^2 \geqslant \sum_{i=1}^{n} |a_i|^2 \tag{11}$$

其中

$$a_i = (u_i,u) \tag{12}$$

并且矢量 u'

$$u' \equiv u - \sum_i a_i u_i \tag{13}$$

与每一个 u_i 正交，即 $(u',u_i)=0$.

〔**证明**〕首先证明定理的第一部分，即不等式(11)式.

$$\begin{aligned}0 \leqslant \|u'\|^2 &= (u',u') \\ &= (u - \sum_i a_i u_i, u - \sum_j a_j u_j)\end{aligned}$$

$$= (u,u) - \sum_i \alpha_i^* (u_i,u) - \sum_j \alpha_j (u,u_j) + \sum_{i,j} \alpha_i^* \alpha_j (u_i,u_j)$$

$$= \| u \|^2 - \sum_i \alpha_i^* \alpha_i - \sum_j \alpha_j \alpha_j^* + \sum_{i,j} \alpha_i^* \alpha_j \delta_{ij}$$

$$= \| u \|^2 - \sum_i |\alpha_i|^2 - \sum_j |\alpha_j|^2 + \sum_j |\alpha_j|^2$$

$$= \| u \|^2 - \sum_i |\alpha_i|^2$$

由此即可得(11)式，其中我们用了$(u_i,u_j)=\delta_{ij}$. 下面证明定理的第二部分：

$$(u',u_j) = (u - \sum_i \alpha_i u_i, u_j)$$

$$= (u,u_j) - \sum_i \alpha_i^* (u_i,u_j)$$

$$= (u_j,u)^* - \sum_i \alpha_i^* \delta_{ij}$$

$$= \alpha_j^* - \alpha_j^* = 0 \tag{14}$$

(4)许瓦尔兹不等式(Schwarz's ineguality)

如果u,v是内积空间的矢量，则

$$|(u,v)| \leqslant \| u \| \cdot \| v \| \tag{15}$$

〔证明〕如$v=0$，则上式两边为零，如果$v\neq 0$，则单位矢量$v/\| v \|$组成正交归一集，利用贝塞尔不等式有

$$|(u,\frac{v}{\| v \|})|^2 \leqslant \| u \|^2$$

即
$$\frac{1}{\| v \|^2}|(u,v)|^2 \leqslant \| u \|^2$$

故有
$$|(u,v)| \leqslant \| u \| \cdot \| v \|$$

(5)三角形不等式

$$\| u + v \| \leqslant \| u \| + \| v \| \tag{16}$$

〔证明〕因为对于任意复数a，有$\text{Re}a \leqslant |a|$. 现取$u+v$的模方$\| u+v \|^2$:

$$\| u + v \|^2 = (u + v, u + v)$$

$$= \| u \|^2 + (u,v) + (v,u) + \| v \|^2$$

$$= \| u \|^2 + (u,v) + (u,v)^* + \| v \|^2$$

注意到
$$(u,v) + (u,v)^* = 2\mathrm{Re}(u,v)$$
$$\mathrm{Re}a \leqslant |a|$$

以及许瓦尔兹不等式，则

$$\begin{aligned} \| u+v \|^2 &= \| u \|^2 + 2\mathrm{Re}(u,v) + \| v \|^2 \\ &\leqslant \| u \|^2 + 2|(u,v)| + \| v \|^2 \\ &\leqslant \| u \|^2 + 2\| u \| \cdot \| v \| + \| v \|^2 \\ &= (\| u \| + \| v \|)^2 \end{aligned}$$

由此可得
$$\| u+v \| \leqslant \| u \| + \| v \|$$

§3 希尔伯特空间

1. 柯西序列

若我们能使每一正整数 n 联系于一数 c_n（一般是复数），则称这些数 $c_1, c_2, c_3, \cdots, c_n, \cdots$ 组成一无穷序列，或者简单地说，组成一序列.

如果对于每一正实数 ε，无论它怎么小，都存在一个有限的正整数 N，使得对每一整数 $n>N$，都有

$$|c_n - n| < \varepsilon \tag{1}$$

则称序列 $c_1, c_2, \cdots, c_n, \cdots$ 收敛于 c，或说序列是收敛的(convergent)，并以 c 为极限(limit).

如果对于每一正实数 ε，无论它怎样小，我们都可以找到一个正整数 N，使得对任意两个整数 $n>N$ 和 $m>N$，都有

$$|c_n - c_m| < \varepsilon \tag{2}$$

则称序列 $c_1, c_2, \cdots, c_n, \cdots$ 为柯西序列(Cauchy sequence).

收敛序列，因而也是柯西序列的例子：

(a)序列 $1, \frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \cdots, \frac{1}{n}, \cdots$，它的极限为 $c=0$.

(b)通项为 $c_n = 2+\frac{5}{n}$ 的实数序列 $7, \frac{9}{2}, \frac{11}{3}, \frac{13}{4}, 3, \frac{17}{6}, \cdots, (2n+5)/n, \cdots$，它的极限为 $c=2$.

(c)序列 1.9,1.99,1.999,…,它的根极为 $c=2$.

(d)通项为 $c_n=\frac{(5n+3)}{4n}+i\frac{(2n-8)}{3n}$的复数序列,它的极限为 $c=\frac{5}{4}+i\frac{2}{3}$.

以下的序列是发散的(divergent):

(a)通项是 $c_n=p^n(p>1)$的序列.

(b)正整数序列 1,2,3,…,n,….

尽管在上面的讨论中,我们是针对(实或复)数定义序列的,但应该很清楚,不难把这个概念推广到任意对象的序列,只要它们具有同样的性质.这样,我们就可以说二维或三维空间中矢量的序列,n 维空间中 n 数组的序列,等等.当然,在每种情况下,当研究它们的收敛性时,都必须适当地解释 $|c_n-c|$ 和 $|c_n-c_m|$.下面以 n 数组序列为例说明之,因为所有别的例子都可以作为它的特殊情况得出.

考虑所有 n 数组(实的或复的)的矢量空间中的元素序列 $u^{(1)},u^{(2)},\cdots,u^{(k)},\cdots$其中

$$u^{(k)}\equiv(a_1^{(k)},a_2^{(k)},\cdots,a_n^{(k)}) \tag{3}$$

如果对每一正实数 ε,都存在正整数 N,使得对任意两个整数 $k>N$ 和 $m>N$,都有

$$|u^{(k)}-u^{(m)}|<\varepsilon \tag{4}$$

即

$$|u_i^{(k)}-u_i^{(m)}|<\varepsilon,\quad 对所有\ 1\leqslant i\leqslant n \tag{5}$$

则称序列 $u^{(1)},u^{(2)},\cdots,u^{(k)},\cdots$为柯西序列.

同样,如果对于每一正实数 ε,我们能够找到一个正整数 N,使得对所有整数 $m>N$,都有

$$|u^{(m)}-u|<\varepsilon \tag{6}$$

即

$$|a_i^{(m)}-a_i|<\varepsilon,\quad 对所有\ 1\leqslant i\leqslant n \tag{7}$$

则称序列 $u^{(1)},u^{(2)},\cdots,u^{(k)},\cdots$收敛于极限 $u\equiv(a_1,a_2,\cdots,a_n)$.

2.希尔伯特空间

现在我们来定义希尔伯特空间.

考虑内积空间 L.如果属于 L 的元素的每一个柯西序列都有

一极限属于 L，则称空间 L 是完备的. 一个完备的复内积空间称为希尔伯特空间.

希尔伯特空间的例子和反例都很容易构造. 上面讨论的所有内积空间，除所有有理数 n 数组的矢量空间（包括 $n=1$ 的特殊情况，即全部有理数的集合）外，全都是希尔伯特空间. 所有有理数的空间是不完备的，因为我们可以构造此空间中的一个柯西序列其极限是无理数，不属此空间. 例如，2 的平方根的诸近似值的序列 1.414，1.4142，1.41421，1.414213，…，它是一个柯西序列，但其极限 $\sqrt{2}$ 不属于有理数的集合. 类似的讨论表明，所有有理数 n 数组的集合不是希尔伯特空间.

下面我们将一般地讨论希尔伯特空间. 我们把 n 维（维数在稍后定义）希尔伯特空间记作 L_n. 尽管在现代纯粹物理和数学中，不应单靠画图列表来理解所讨论的内容，但通过某些特殊的二维或三维例子弄清概念仍是可取的. 现将某些重要概念和性质列举如下.

(1)线性无关

在通常的三维位置矢量空间中，我们需要三个轴的集合，此空间中任一点的位置可由沿这些轴测定的三个坐标所确定. 类似地，在 n 维矢量空间中，我们需要 n 个“独立的”矢量 $r_1, r_2, \cdots, r_n$ 的集合来“张成”整个空间(to“span”the whole space).

若两个矢量 r_i 和 r_j 中的一个矢量不是另一个矢量的常数倍，即不可能找到一个数 c，使得 $r_i = cr_j$，则称它们是彼此线性无关的 (linearly independent). 习惯上说 r_i 和 r_j 不是相互“平行”的矢量.

一般地，当且仅当

$$\sum_{i=1}^{m} a_i r_i = 0 \tag{8}$$

仅对所有的数 $a_i = 0 (1 \leqslant i \leqslant m)$ 时才成立，则称 L_n 的 m 个矢量构成一线性无关的矢量集合. 换言之，m 个线性无关的矢量集中没有一个矢量可以表成其余 $(m-1)$ 个矢量的线性组合(linear combination).

检验矢量集的线性无关性的一个简单方法是构造它们相互间的标积行列式(determinant)

$$\Gamma = \begin{vmatrix} (r_1,r_1) & (r_1,r_2) & (r_1,r_3) & \cdots & (r_1,r_m) \\ (r_2,r_1) & (r_2,r_2) & (r_2,r_3) & \cdots & (r_2,r_m) \\ \vdots & & & & \\ (r_m,r_1) & (r_m,r_2) & (r_m,r_3) & \cdots & (r_m,r_m) \end{vmatrix}$$

通常称为格兰姆(Gram)行列式. 如果 $\Gamma=0$,则矢量之一可以表成其余$(m-1)$个矢量的线性组合,因而诸矢量线性相关(linearly dependent);反之,如果 $\Gamma\neq0$,则诸矢量线性无关.

(2)空间的维数

矢量空间的维数(dimension)是空间中线性无关的矢量最大个数,或者是张成全空间的线性无关的矢量的个数,也就是空间中完全集所含矢量的个数. 例如,在普通的三维位置矢量空间中,我们最多能找到三个线性无关的矢量,张成空间所需要的最少的线性无关矢量的个数就是 3.

(3)完备集

在一个 n 维完备矢量空间或希尔伯特空间中,n 个线性无关的矢量集称为 L_n 中完备集,此空间中的每一个矢量都能表为这个完备集的线性组合,即空间中每一个矢量都可写成如下形式

$$r = \sum_{i=1}^{n} a_i r_i \tag{9}$$

其中 a_i 是复数.

若在 L_n 中选取 k 个相互独立的矢量$(k<n)$,则称之为 L_n 中的不完备集;显然,它们不足以张成全空间. 另一方面,若在 L_n 在选出多于 n 个的矢量,则它们组成一个超完备集或过剩集. 这些矢量不可能全部线性无关,可以找到至少两个非零数 a_i,使得①

---

① 此结论是对 r_i 全为非零矢量的情况而言的. 若允许 r_i 中有零矢量时,则可以只有一个非零系数.

$$\sum_{i=1}^{m} a_i r_i = 0, \quad m > n \tag{10}$$

(4)基矢

一个 n 维矢量空间可以有许多组完全集. 任一个完全集,或任一组 n 个线性无关的矢量就称为此空间的基(basis),这些矢量称为基矢(basis vectors). 显然,基的选择不是唯一的,有无穷多种选择方法.

L_n 中任一矢量 u 可按基矢 r_i 的完备集展开

$$u = \sum_{i=1}^{n} a_i r_i \tag{11}$$

其中 a_i 是 u 沿 r_i 的分量, 也称为 u 的傅立叶系数(Fourier coefficients),而(11)式则称为傅立叶展开式(Fourier expansion). 当(11)式成立,即当 $\{r_i\}$ 是完备集时,空间 L_n 可由基矢张成.

现在我们来选定空间 L_n 中矢量模的单位(通俗地说,矢量"长度"的单位). 具有单位模的矢量称为单位矢量或归一化矢量. 我们往往选取由 L_n 中的单位矢量 $e_1, e_2, \cdots, e_n$ 构成的基,而不采用任意长度的基矢构成的基.

为了方便和为了代数运算更简单,我们选一个由正交基矢构成的完备集,这并不损害普遍性. 对通常的三维空间,这意味着选取笛卡儿坐标轴而不选斜坐标轴. 若 e_i 是正交归一基矢,则有

$$(e_i, e_j) = \delta_{ij}. \tag{12}$$

其中 δ_{ij} 是由下式给出的 Kronecker 符号:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & 若\ i = j \\ 0, & 若\ i \neq j \end{cases} \tag{13}$$

(5)两矢量的标积

利用正交归一基矢,两矢量

$$u = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i e_i, \qquad v = \sum_{i=1}^{n} \beta_i e_i$$

的标积可表为

$$(u, v) = \left(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i e_i, \sum_{j=1}^{n} \beta_j e_j\right)$$

$$= \sum_i \sum_j \alpha_i^* \beta_j (e_i, e_j)$$

$$= \sum_i \sum_j \alpha_i^* \beta_j \delta_{ij}$$

$$= \sum_i \alpha_i^* \beta_i \tag{14}$$

由此可得到矢量的模方

$$\| u \|^2 = (u,u) = \sum_i |\alpha_i|^2 \tag{15}$$

(6)空间的直和·子空间

现在我们来介绍两个或多个空间的直和的概念.

考虑具有基矢$(e_1, e_2, \cdots, e_n)$的 n 维矢量空间 L_n 和具有基矢$(i_1, i_2, \cdots, i_m)$的 m 维矢量空间 L_m，只要两个空间除零矢量外别无公共矢量，直和空间(direct-sum space)L_t 就是由 $q=m+n$ 个基矢$(e_1, e_2, \cdots, e_n, i_1, i_2, \cdots, i_m)$所确定的矢量空间. 这些基矢可以改写作 q 个矢量$(k_1, k_2, \cdots, k_q)$. 若 L_m 和 L_n 都是完备空间，则 L_q 也是完备空间.

于是，L_q 中任一矢量 u 可以展成下式

$$u = \sum_{i=1}^{q} \alpha_i k_i \tag{16}$$

其中 α_i 是数.

作为一个简单的例子，考虑基矢为(x,y)的二维矢量空间(平面)与基矢为(z)的一维矢量空间(直线)，此直线不在该平面内. 若两空间具有公共的零元，则直和空间就是基矢为(x,y,z)的三维空间.

反之，常常把一个空间分解为若干个子空间(subspace)之和. 设空间 L 具有正交归一基$\{e_i\}$，$i=1,2,\cdots,n$，有可能选取$\{e_i\}$的子集(subset)构成一个矢量空间 L_1，其中 $i=1,2,\cdots,m<n$，称 L_1 为 L 的子空间. 原来的空间 L 相对于它的子空间来说，有时为了方便称它为大空间. 显然，子空间的维数小于或等于大空间的维数；当两者相等时，子空间就是大空间本身. 在$\{e_i\}$中除了构成子空间 L_1 的基矢外，剩下的基矢构成另一子空间 L_2，称为子空间 L_1 的正交

互补(orthogonal complement)空间,常常写作

$$L = L_1 + L_2 \tag{17}$$

子空间 L_1 中任一矢量同其正交补空间 L_2 中的任一矢量都是正交的.一个子空间同它的正交补空间只有一个公共元素,那就是零矢量.大空间中任一矢量可表为子空间 L_1 中一个确定的矢量与其正交补空间中一个确定矢量之和,而且这种表示是唯一的.

(7)空间的直积

最后我们讨论两个空间的直积(direct product or Kronecker product).再考虑上面定义的两个空间 L_n 和 L_m.直积空间(direct product space)是由 $p=nm$ 个基矢($e_1i_1, e_1i_2, \cdots, e_1i_m, e_2i_1, \cdots, e_2i_m, \cdots, e_ni_1, \cdots, e_ni_m$)所确定的 p 维空间 L_p.若把所得的基矢重新编号为($l_1, l_2, \cdots, l_p$),则和前面一样,当 L_n 和 L_m 是完备空间时,它们构成 L_p 中的一个完备集.于是,任一矢量 $v \in L_p$ 可表为

$$v = \sum_{j=1}^{p} \beta_j l_j \tag{18}$$

§4 左矢空间和右矢空间

前述内积空间的定义可知,两个矢量 u 和 v 的内积 (u,v) 是与 u,v 的次序有关的,即一般说来 $(u,v) \neq (v,u)$.而且,同一矢量,作为内积的前因子和后因子,其地位是不同的.事实上,内积对于后因子是线性的,即

$$(u, av + bw) = a(u,v) + b(u,w)$$

而内积对于前因子则是反线性的(反线性的定义见§6),即

$$(au + bv, w) = a^*(u,w) + b^*(v,w)$$

狄喇克发现,如果在记法上一直保持一个矢量的前因子或后因子的身分,将会有很多方便之处.于是,他把作为内积后因子的 u 记作 $|u)$,把作为前因子的 u 记作 $(u|$,后来发展成为 $|u\rangle$ 和 $\langle u|$.u 和 v 的内积 (u,v) 则记作 $\langle u|v\rangle$.

为此,必须重新作一些定义.

我们把按§1(2)式定义的矢量空间称为右矢空间，矢量称为右矢或刃(ket)，用$|u\rangle$，$|v\rangle$表示. 零右矢用$|0\rangle$表示.

我们再建立一个矢量空间，其中每个矢量都同右矢空间中的矢量有一一对应关系. 这个新的空间称为左矢空间，矢量称为左矢或刁(bra)，用$\langle u|$表示与右矢$|u\rangle$相应的左矢，$\langle v|$与$|v\rangle$相对应. 将与$|0\rangle$相应的左矢$\langle 0|$称为零左矢.

我们规定，不同种类的矢量之间，即右矢和左矢之间，没有相加的运算；相同种类的矢量之间，即右矢与右矢之间或左矢与左矢之间，没有内积的运算，而在一个左矢与一个右矢之间定义一个内积运算.

对应于§2(1)式的内积运算，我们规定一种确定的对应方法，使一个左矢$\langle u|$与一个右矢$|v\rangle$总有一个复数c与之对应，这种对应称为$\langle u|$与$|v\rangle$的内积，记作

$$\langle u|v\rangle = c \tag{1}$$

具有如下性质：

$$\left.\begin{array}{l}\langle u|v\rangle = \langle v|u\rangle^* \\ \langle w|au + bv\rangle = a\langle w|u\rangle + b\langle w|v\rangle \\ \langle u|v\rangle \geqslant 0, \quad \text{当且仅当 } |u\rangle = |0\rangle \text{ 时等式成立}\end{array}\right\} \tag{2}$$

有时我们说两个右矢$|u\rangle$和$|v\rangle$的内积，是指与$|u\rangle$相应的左矢$\langle u|$与右矢$|v\rangle$的内积$\langle u|v\rangle$. 同样，我们说两个右矢$|u\rangle$、$|v\rangle$正交，是指$\langle u|v\rangle=0$.

在作了上述改变之后，便从一个单一的空间发展到两个互为对偶的空间(dual spaces). 前面讨论过的各种关系，都可以改写成右矢或左矢的形式.

可以证明，

(i) 若 $|w\rangle = |u\rangle + |v\rangle$

则 $\langle w| = \langle u| + \langle v|$ (3)

(ii) $$\langle cu|v\rangle = c^*\langle u|v\rangle \tag{4}$$

这是因为

$$\langle cu|v\rangle = \langle v|cu\rangle^* = \langle v|u\rangle^* c^* = c^*\langle u|v\rangle$$

(iii)与右矢

相对应的左矢是

$$\left.\begin{aligned}|cu\rangle &= c|u\rangle \\ \langle cu| &= c^*\langle u|\end{aligned}\right\} \tag{5}$$

〔证明〕根据(4)式

$$\langle cu|v\rangle = c^*\langle u|v\rangle$$

由此得

$$\{\langle cu| - c^*\langle u|\}|v\rangle = 0$$

上式对任意右矢$|v\rangle$均成立，故得

$$\langle cu| - c^*\langle u| = 0$$

即

$$\langle cu| = c^*\langle u|$$

§5 函数空间

1. 函数空间

考虑所有连续的，"平方可积"(square integrable)[①]的函数集合$(f,g,h,\cdots)$，这些函数是区间(a,b)上一个独立变量x的函数. 两个函数相等的定义如下：当且仅当区间(a,b)上的所有x值都有$f(x)=g(x)$时，两个函数f和g在区间(a,b)上相等，并记作$f=g$.

参照§1矢量空间的定义，如果我们定义两个函数的加法及函数的数乘如下：

$$(f+g)(x) = f(x) + g(x) \tag{1a}$$

$$(cf)(x) = cf(x) \tag{1b}$$

则函数的集合$(f,g,h,\cdots)$是域F上的一个矢量空间. (1a)式称为两个函数的逐点加法运算.

以函数为元素的矢量空间也叫做函数空间(function space).

若所考虑的函数是实的，则我们得到一个实数域上的矢量空间；若它们是复的，则我们得到一个复数域上的矢量空间. 在这两种情况下，零元都是对(a,b)上所有x值恒等于零的函数，而函数f的逆元是函数$-f$：

---

① 若函数的模有限，则称函数是平方可积的.

$$(-f)(x)=-f(x) \tag{2}$$

即函数 $-f$ 在点 x 的值是 x 点处 f 值的负值.

作为一个具体例子，考虑 x 的以 $2l$ 为周期的连续的平方可积的偶周期函数(even periodic function)的全体所成的集合 $\{f_e(x)\}$，即亦满足下列关系的函数的集合

$$\left.\begin{aligned} f_e(x+2l)&=f_e(x)\\ f_e(-x)&=f_e(x)\end{aligned}\right\} \tag{3}$$

一般说来，我们允许此集合包含复值函数. 此集合中两函数的和仍是连续的平方可积的以 $2l$ 为周期的偶函数，因而仍属于该集合. 此外，(1b)式定义的乘以复数运算满足条件 § 1(2)式. 由此得出，集合 $\{f_e(x)\}$ 是一个矢量空间，记作 L_e. 此空间中任一函数可展成熟知的傅立叶余弦级数(Fourier cosine series)：

$$f(x)=\sum_{n=0}^{\infty}a(n)\frac{1}{\sqrt{l}}\cos\frac{n\pi x}{l} \tag{4}$$

函数 $\frac{1}{\sqrt{l}}\cos\frac{n\pi x}{l}$ $(0\leqslant n<\infty)$ 组成的无穷集合，显然是该空间的一个正交归一基，因为其中的函数满足关系

$$\frac{1}{l}\int_{-l}^{l}\cos\frac{n\pi x}{l}\cos\frac{m\pi x}{l}\mathrm{d}x=\delta_{mn} \tag{5}$$

上式中 n 和 m 不同时为零. 上面考虑的矢量空间是可数无穷维的.

函数空间 L_e 的对偶空间也是同一域上的矢量空间，它由函数集合 $(a,b,c,\cdots)$ 构成，其矢量与 L_e 的矢量一一对应，故对偶空间也是可数无穷维的. 构成此对偶空间的矢量 $a(n)$ 就是(4)式中的系数，它可由傅立叶反演得出

$$\left.\begin{aligned} a(n)&=\int_{-l}^{l}f(x)\frac{1}{\sqrt{l}}\cos\frac{n\pi x}{l}\mathrm{d}x,\quad n=1,2,\cdots\\ a(0)&=\int_{-l}^{l}\frac{1}{2\sqrt{l}}f(x)\mathrm{d}x\end{aligned}\right\} \tag{4'}$$

现考虑所有连续的、平方可积的、以 $2l$ 为周期的奇周期函数(odd periodic function)的集合 $\{f_o(x)\}$，亦即满足下列关系的函数的

集合：

$$\left.\begin{aligned} f_o(x+2l) &= f_o(x) \\ f_o(-x) &= -f_o(x) \end{aligned}\right\} \tag{6}$$

象上面讨论过的偶周期函数的集合$\{f_e(x)\}$是一个矢量空间L_e一样，(6)式定义的奇周期函数的集合$\{f_o(x)\}$也是一个矢量空间，记作L_o. L_o的任一函数$\varphi(x)$可展成熟知的傅立叶正弦级数(Fourier sine series)：

$$\varphi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a(n) \frac{1}{\sqrt{l}} \sin \frac{n\pi x}{l} \tag{7}$$

函数$\frac{1}{\sqrt{l}} \sin \frac{n\pi x}{l}$$(1 \leqslant n < \infty)$的无穷集合可以选作此空间的正交归一基，因为其中的函数满足关系

$$\frac{1}{l} \int_{-l}^{l} \sin \frac{n\pi x}{l} \sin \frac{m\pi x}{l} \mathrm{d}x = \delta_{mn} \tag{8}$$

同样，L_o空间也是可数无穷的.

L_o的对偶空间是所有函数$(\alpha, \beta, \gamma, \cdots)$的集合，也是同一域上的矢量空间，其中每一元素是$L_o$中某一元素的傅立叶变换.

以上各节所建立的概念都适用于函数空间. 这是由于，象在第一章针对群所强调的那样，矢量空间的数学定义与其元素的具体性质无关. 这使我们可以用同一抽象的方法处理不同的矢量空间.

2. 内积空间

只要我们使任意两个函数对应于一个数并满足条件§2(1)式，就可以把函数空间构造成内积空间. 为此，定义两个函数的内积为

$$(f, g) = \int_a^b f^*(x) g(x) \mathrm{d}x \tag{9}$$

上式积分区域是空间中各函数的定义域$[a, b]$. 函数f的模$\| f \|$由下式给出：

$$\| f \|^2 = (f, f) = \int_a^b |f(x)|^2 \mathrm{d}x \tag{10}$$

3. 柯西序列与希尔伯特空间

为了对物理学家有用，内积空间必须又是完备的．一个完备的空间，即在其中不存在函数的柯西序列趋于空间之外的极限．

函数的柯西序列定义如下：称单变量 x 的函数序列 $f_1, f_2, \cdots, f_n, \cdots$ 是 $[a,b]$ 上的柯西序列，其意义是：若对每一正实数 ε，都能找到正整数 N，使得对所有的整数 $n>N$ 和 $m>N$，都有

$$\| f_n - f_m \| < \varepsilon \tag{11}$$

即

$$\int_a^b |f_n(x) - f_m(x)|^2 \mathrm{d}x < \varepsilon \tag{12}$$

用类似的方法，我们可以定义收敛序列及其极限．由此便可得出函数的希尔伯特空间的定义．

4. 函数空间的直和

因为对所有 x 值恒等于零的函数既是奇函数又是偶函数，故它是 L_e 和 L_o 这两个空间的公共“零”元．除此之外，L_e 和 L_o 没有别的公共元素，这样我们就可以取这两个函数空间的直和了．于是，我们得到一个以 $2l$ 为周期的全部周期函数的空间．这个空间中的函数的傅立叶展开是

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a(n) \frac{1}{\sqrt{l}} \cos \frac{n\pi x}{l} + \sum_{n=1}^{\infty} a(n) \frac{1}{\sqrt{l}} \sin \frac{n\pi x}{l} \tag{13}$$

这个空间的基矢显然是正交归一化的．因为除了(5)式和(8)式外，它们还满足

$$\frac{1}{l} \int_{-l}^{l} \cos \frac{n\pi x}{l} \sin \frac{m\pi x}{l} \mathrm{d}x = 0 \tag{14}$$

上式对所有的 n 和 m 都成立．

空间 L_e、L_o 及它们的直和都是可数无穷维的．

可以把本节的概念推广到多于一个变量的函数．

§6 算　　符

上面介绍了希尔伯特空间的概念，现在转而讨论在此空间上运算的算符. 线性空间 L 中的线性变换(linear transformation)可由一个线性算符 T 确定. 此算符作用于 $u\in L$，给出仍属于 L 的矢量 v，即

$$Tu = v, \quad 其中 v \in L \tag{1}$$

我们称此算符定义在空间 L 上，也说空间 L 在 T 作用下是封闭的.

对于函数空间，设任意函数 $f\in L$，则有

$$Tf(x) = g(x), \quad 其中 g \in L \tag{2}$$

式中自变数(argument)x 代表 L 中函数所依赖的变量的集合.

1. 线性算符

对于空间 L 中的任意函数 f 和 g，若都有

$$T(cf + dg) = cTf + dTg \tag{3}$$

则称算符 T 为线性算符(linear operator)，其中 c 和 d 是定义 L 的域中的任意数.

2. 反线性算符

若

$$T(cf + dg) = c^*Tf + d^*Tg \tag{4}$$

则称 T 为反线性算符(antilinear operator). 这种算符的一个明显例子是取复数共轭的算符 K：

$$Kf = f^* \tag{5}$$

于是有

$$K(cf) = c^*f^* = c^*Kf \tag{6}$$

显然，上式满足(4)式，故 K 是反线性算符.

在量子力学中出现的算符，绝大多数都是线性算符. 以后如果没有特别申明，都是指线性算符，并且往往省略“线性”二字.

3. 基矢的变换・算符的矩阵表示

因为矢量空间 L_n 中一切矢量都是由基矢迭加而成的，所以，

要知道一个线性算符 T 对空间中任一函数的作用，只须知道它对 L_n 的基矢（基函数）的作用就足够了．这样，当算符 T 作用于一基矢 $\varphi_i(x)$ 时，所得到的是 L_n 中的某个函数，比如是 $\varphi_i'(x)$，可以把它展成原基矢的线性组合：

$$T\varphi_i(x) = \varphi_i'(x) = \sum_{j=1}^{n} T_j \varphi_j(x)$$

但是，明显地，系数 T_j 应与原基矢 φ_i 的指标 i 有关，因此，将 T_j 表为 T_{ji} 是合理的．于是

$$\begin{aligned} \varphi_i'(x) &= T\varphi_i(x) \\ &= \sum_{j=1}^{n} T_{ji}\varphi_j(x), \quad i = 1,2,\cdots,n \end{aligned} \tag{7}$$

上式代表一个线性方程组，i 的每一个值对应于其中一个线性方程．全部基矢的变换便由 n^2 个系数 T_{ji} 给出，由此可得出另一组基矢 $\{\varphi_i'(x)\}$．

利用基矢函数的正交归一性

$$(\varphi_i(x), \varphi_j(x)) = \delta_{ij} \tag{8}$$

可求出 T_{ji}．事实上，

$$\begin{aligned} (\varphi_j, \varphi_i') &= (\varphi_j, T\varphi_i) \\ &= (\varphi_j, \sum_k T_{ki}\varphi_k) \\ &= \sum_k T_{ki}(\varphi_j, \varphi_k) \\ &= \sum_k T_{ki}\delta_{jk} \\ &= T_{ji}. \end{aligned} \tag{9}$$

我们称 T_{ji} 为算符 T 在基矢 $\varphi_j(x)$ 和 $\varphi_j'(x)$ 之间的矩阵元．可见，矩阵元 T_{ji} 是两基矢 $\varphi_j(x)$ 和 $T\varphi_i(x)$ 的标积 $(\varphi_j(x), T\varphi_i(x))$，也就是算符 T 作用于 $\varphi_i(x)$ 所得矢量 $T\varphi_i(x)$ 沿 $\varphi_j(x)$ 方向的投影．

系数 T_{ji} 的集合可组成一矩阵（matrix）T，T_{ji} 就是 T 的第 j 行第 i 列矩阵元．注意到 $i=1,2,\cdots,n$，$j=1,2,\cdots,n$，矩阵 $[T_{ji}] \equiv T$ 实际上是 n 阶方阵

$$T = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & \cdots & T_{1n} \\ T_{21} & T_{22} & \cdots & T_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ T_{n1} & T_{n2} & \cdots & T_{nn} \end{bmatrix} \tag{10}$$

称为算符 T 对基 $\{\varphi_i(x)\}$ 的一个矩阵表示. 于是(7)式可表示为矩阵形式(matrix form):

$$\begin{pmatrix} \varphi_1' \\ \varphi_2' \\ \vdots \\ \varphi_n' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & \cdots & T_{1n} \\ T_{21} & T_{22} & \cdots & T_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ T_{n1} & T_{n2} & \cdots & T_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \vdots \\ \varphi_n \end{pmatrix} \tag{11}$$

4. 函数的变换

现在我们来讨论函数(矢量)的变换(2)式. 利用系数 T_{ji}，可以将(2)式表为更明显的形式. 将函数 $f(x)$ 和 $g(x)$ 按基函数 $\varphi_i(x)$ 展开:

$$f(x) = \sum_{i=1}^{n} c_i \varphi_i(x)$$

$$g(x) = \sum_{j=1}^{n} d_j \varphi_j(x)$$

将上式代入(2)式并利用(7)式得

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{n} d_j \varphi_j(x) &= \sum_{i=1}^{n} c_i T \varphi_i(x) \\ &= \sum_{i=1}^{n} c_i \sum_{j=1}^{n} T_{ji} \varphi_j(x) \\ &= \sum_{j} \{ \sum_{i} T_{ji} c_i \} \varphi_j(x) \end{aligned}$$

从而得到

$$d_j = \sum_{i=1}^{n} T_{ji} c_i, \quad j = 1, 2, \cdots, n \tag{12}$$

式中 c_i 和 d_i 是函数 $f(x)$ 和 $g(x)$ 对同一基 $\varphi_i(x)$ 的分量，它们之间也是通过系数 T_{ji} 按(12)式联系起来.

(12)式也可表为矩阵形式:

$$\begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & \cdots & T_{1n} \\ T_{21} & T_{22} & \cdots & T_{2n} \\ \vdots & & & \\ T_{n1} & T_{n2} & \cdots & T_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} T_{1i} c_i \\ \sum_{i=1}^{n} T_{2i} c_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^{n} T_{ni} c_i \end{pmatrix} \tag{13}$$

值得注意，(7)和(12)两式均出现变换系数 T_{ji}，但前者对第一个下标求和，后者对第二个下标求和. (11)式中的矩阵是(13)式中矩阵的转置(transpose). (7)式是变换后的基矢与原基矢之间的联系，而(12)式是变换后的任意矢量与原矢量在同一基(原来的基)上的分量之间的联系.

最后，如果我们引入列矢量(column vecter)

$$g = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_n \end{pmatrix}, \quad f = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} \tag{14}$$

则(13)式可用矩阵符号表成

$$g = Tf \tag{15}$$

§7 算符的运算

1. 算符相等

两算符 S 和 T 如果对空间中任意的函数 $f(x)$ 均有

$$Sf(x) = Tf(x) \tag{1}$$

则称此两算符相等，记为

$$S = T$$

2. 算符相加

如果对空间中任意函数 $f(x)$ 均有

$$Uf(x) = Sf(x) + Tf(x)$$
$$= (S + T)f(x) \tag{2}$$

则称算符 S 和 T 相加的结果是算符 U. 记为

$$U = S + T$$

3. 算符相乘

若对空间中任意函数 $f(x)$均有

$$Uf(x) = S(Tf(x)) = (ST)f(x) \tag{3}$$

则称算符 S 和 T 相乘的结果是算符 U. 记为

$$U = ST$$

算符相乘的运算代表连续施行两个变换，首先是 T 变换，然后是 S 变换. 应该注意，这两个变换的先后次序不一定可对调，即 ST 和 TS 可能引起不同的效果. 因此，一般说来，$ST \neq TS$. 如果

$$STf(x) = TSf(x) \tag{4}$$

则称算符 S 和 T 可对易(commutative)

$$ST = TS$$

而

$$(S,T) \equiv ST - TS \tag{5}$$

则称为两算符 S 和 T 的对易子(commutator). 显然，如果两算符 S 和 T 对易，则有

$$(S,T) \equiv ST - TS = 0 \tag{6}$$

现在我们来求算符乘积的矩阵元，设

$$S\varphi_k(x) = \sum_i S_{ik}\varphi_i(x)$$

$$T\varphi_j(x) = \sum_k T_{kj}\varphi_k(x)$$

于是

$$ST\varphi_j(x) = S\sum_k T_{kj}\varphi_k(x)$$
$$= \sum_k T_{kj}S\varphi_k(x)$$
$$= \sum_k \sum_i T_{kj}S_{ik}\varphi_i(x)$$
$$= \sum_i \{ \sum_k S_{ik}T_{kj} \} \varphi_i(x)$$

另一方面，$$ST\varphi_j(x) = \sum_i (ST)_{ij}\varphi_i(x)$$

比较上面两式可得
$$(ST)_{ij} = \sum_k S_{ik}T_{kj} \tag{7}$$

4. 逆算符

在矢量空间 L 中给定了算符 T，则有
$$Tf(x) = g(x) \tag{8}$$
若存在一个算符 T^{-1}，满足
$$T^{-1}g(x) = f(x) \tag{9}$$
则称 T^{-1}是算符 T 的逆算符(inverse operator). 显然，逆算符 T^{-1}满足
$$TT^{-1} = T^{-1}T = E \tag{10}$$
式中 E 是恒等算符或单位算符，它在任何正交归一基中用对角的单位矩阵表示：
$$E_{ij} = \delta_{ij} \tag{11}$$
或
$$E = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & 1 & & 0 & \\ & & 1 & & \\ & 0 & & \ddots & \\ & & & & 1 \end{bmatrix} \tag{12}$$

值得注意，不是所有算符都有它的逆算符. 由(10)式可求得
$$(T^{-1})_{ij} = \frac{[T_{ji}]}{\det T} \tag{13}$$
式中 $\det T$ 是由 T 的矩阵元组成的行列式
$$\det T = \begin{vmatrix} T_{11} & T_{12} & \cdots & T_{1n} \\ T_{21} & T_{22} & \cdots & T_{2n} \\ \vdots & & & \\ T_{n1} & T_{n2} & \cdots & T_{nn} \end{vmatrix} \tag{14}$$
(对无限维空间，行列式必须用 Fredgalm 行列式代替). 由(13)式可知，仅当算符 T 的矩阵行列式不为零时逆算符才存在；换句话说，仅仅非奇异算符(nonsingular operator)才有逆算符.

容易证明

$$(ST)^{-1} = T^{-1}S^{-1} \tag{15}$$

5. 相似变换

假定算符 T 变换 $f(x)$为 $g(x)$，即

$$Tf(x) = g(x) \tag{16}$$

如果另一算符 S 把 $f(x)$变为 $f'(x)$，把 $g(x)$变为 $g'(x)$，即

$$Sf(x) = f'(x) \tag{17}$$

$$Sg(x) = g'(x) \tag{18}$$

那么，把 $f'(x)$变为 $g'(x)$的算符 T'是什么呢？即要求

$$T'f'(x) = g'(x) \tag{19}$$

中 $T' = ?$

我们注意到

$$g'(x) = Sg(x) = STf(x) = STS^{-1}f'(x)$$

与(19)式比较得到

$$T' = STS^{-1} \tag{20}$$

这一关系在数学上称为相似变换(similarity transformation).

我们把 $f'(x)$，$g'(x)$称为变换后的函数，则称算符 T'为变换后的算符.

算符的变换是一个重要的概念. 我们借助于图 2-1 作直观说明.

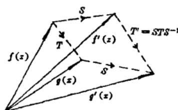


图 2-1

更一般地，算符 S 可以看作是从空间 L 到空间 L'的变换，使得 $f'(x)$，$g'(x)$和 T'都在空间 L'中.

6. 表象变换

在这一小节，我们要强调抽象的复矢量空间的几何与普通欧几里得空间的几何之间的相似性. 矢量空间中的表象对应于欧几里得空间中的坐标系. 正象我们研究解析几何中的坐标系转动那样，我们必须考虑在矢量空间中从一个表象到另一个表象的变换，

即从一个基变换到另一个基时，矢量和算符如何变换.

我们用不带撇的基$\{\varphi_i\}$表示旧的基，用带撇的基$\{\varphi_i'\}$表示新的基.新的基矢可借助于旧基矢展开为

$$\varphi_i' = \sum_j S_{ji}\varphi_j \tag{21}$$

任一矢量 f 用旧基和新基分别展开为

$$f = \sum_i a_i\varphi_i \tag{22}$$

$$f = \sum_i a_i'\varphi_i' \tag{23}$$

式中 a_i 和 a_i' 分别是矢量 f 在旧基矢 φ_i 和新基矢 φ_i' 上的分量.将(21)式代入(23)式得

$$f = \sum_i a_i' \sum_j S_{ji}\varphi_j = \sum_{ji} S_{ji}a_i'\varphi_j$$

与(22)式比较得

$$a_j = \sum_j S_{ji}a_i', \quad j = 1,2,\cdots,n \tag{24}$$

或写成矩阵形式

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots & S_{1n} \\ S_{21} & S_{22} & \cdots & S_{2n} \\ \vdots & & & \\ S_{n1} & S_{n2} & \cdots & S_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1' \\ a_2' \\ \vdots \\ a_n' \end{pmatrix} \tag{25}$$

若引入

$$a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}, \quad a' = \begin{pmatrix} a_1' \\ a_2' \\ \vdots \\ a_n' \end{pmatrix} \tag{26}$$

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots & S_{1n} \\ S_{21} & S_{22} & \cdots & S_{2n} \\ \vdots & & & \\ S_{n1} & S_{n2} & \cdots & S_{nn} \end{pmatrix} \tag{27}$$

则(25)式简写成

$$a = Sa' \tag{28}$$

或

$$a' = S^{-1}a \tag{29}$$

上两式是同一个矢量在新、旧基上的分量 a_i' 和 a_i 之间的联系，称为矢量 f 从旧基到新基的变换式，或从原表象到新表象的变换式.

现在确定算符 T 在旧表象和新表象中的矩阵 T 和 T' 之间的联系. 对新基，矩阵元为 T'_{ij}，对旧基，矩阵元为 T_{ij}. 一方面

$$\varphi_i'' = T\varphi_i' = \sum_j T'_{ji}\varphi_j' = \sum_j \sum_k T'_{ji} S_{kj} \varphi_k$$

$$= \sum_k \sum_j S_{kj} T'_{ji} \varphi_k \tag{30}$$

另一方面 $$T\varphi_i' = T\sum_l S_{li}\varphi_l = \sum_l S_{li} T\varphi_l$$

$$= \sum_l \sum_k S_{li} T_{kl} \varphi_k = \sum_k \sum_l T_{kl} S_{li} \varphi_k \tag{31}$$

比较(30)和(31)两式得

$$\sum_j S_{kj} T'_{ji} = \sum_l T_{kl} S_{li}$$

即 $$(ST')_{ki} = (TS)_{ki} \tag{32}$$

其矩阵关系为 $$ST' = TS$$

或 $$T' = S^{-1}TS \tag{33}$$

上式就是算符 T 的表示(矩阵)从原表象变换到新表象的变换式，也是由基的变换导致的算符 T 的相似变换.

相似变换不改变矩阵的迹(trace or spur)：

$$\mathrm{Tr}T = \mathrm{Tr}(S^{-1}TS) \tag{34}$$

事实上，利用迹的公式

$$\mathrm{Tr}(ABC) = \mathrm{Tr}(BCA) = \mathrm{Tr}(CAB)$$

便得到 $$\mathrm{Tr}(S^{-1}TS) = \mathrm{Tr}(SS^{-1}T) = \mathrm{Tr}T.$$

相似变换亦不改变算符的矩阵行列式((14)式定义)

$$\det T = \det(S^{-1}TS) \tag{35}$$

事实上，利用行列式公式

$$\det(ABC) = \det A \det B \det C$$

$$\det A^{-1} = \frac{1}{\det A}$$

便有 $$\det(S^{-1}TS) = \det S^{-1} \det T \det S$$

$$=\det S^{-1}\det S\det T$$

$$=\det T$$

由上面可得出结论：矩阵的迹和矩阵行列式是算符的两个不变量(invariants)，它们的值与基的选择无关.

§8 厄密算符和幺正算符

1. 厄密共轭算符和转置算符

若算符 A 和 B 满足关系

$$(f,Ag)=(Bf,g) \tag{1}$$

则称 A、B 互为厄密共轭(Hermitian conjugate)，或称 A、B 互为伴算符(adjoint operator)，记作

$$A^{+}=B,\quad A=B^{+} \tag{2}$$

令 $$f=\sum_i a_i\varphi_i,\quad g=\sum_i b_i\varphi_i$$

利用$\{\varphi_i\}$的正交性，(1)式可变为

$$\sum_{ij}a_i^{*}b_jA_{ij}=\sum_{ij}a_i^{*}b_jB_{ji}^{*} \tag{3}$$

上式对 L 中任意的 f 和 g 均成立，即对任意的 a_i 和 b_i 均成立，从而得到

$$A_{ij}=B_{ji}^{*} \tag{4}$$

当空间 L 是实空间时，(2)和(4)式化为

$$A=\widetilde{B},\quad \widetilde{A}=B,\quad A_{ij}=B_{ji} \tag{5}$$

这时称 A、B 是互为转置矩阵(transpose matrix).

注意到(2)式，也可以把(1)式写成

$$(f,A^{+}g)=(Af,g),\quad 或(A^{+}f,g)=(f,Ag) \tag{6}$$

则称算符 A^{+}为算符 A 的厄密共轭算符或伴算符，此时，(4)改为

$$(A^{+})_{ij}=(A_{ji})^{*} \tag{7}$$

可以证明 $$(AB)^{+}=B^{+}A^{+} \tag{8}$$

事实上，由(6)式有

$$(f,ABg)=((AB)^{+}f,g)$$

另一方面，　$(f,ABg) = (A^+ f, Bg) = (B^+ A^+ f, g)$
比较以上两式便得到(8)式.

2. 厄密算符

若算符 T 是其自身的厄密共轭(伴随)算符，则称为厄密算符(Hermition operator)或自伴算符(self-adjoint operator)：

$$A^+ = A \tag{9}$$

即当(6)式变成　$(f, Ag) = (Af, g)$　(10)

时，A 是厄密的. 这时(7)式变成

$$A_{ij} = A_{ji}^* \tag{11}$$

这正是厄密矩阵(与自身的厄密共轭相等的矩阵)的定义，可写作

$$A = A^+ = (\widetilde{A})^* = \widetilde{A}^* \tag{12}$$

可见，在线性空间中，厄密算符由厄密矩阵表示.

当 L 是实空间时，(9)式可化为

$$\widetilde{A} = A \tag{13}$$

(11)式化为　$A_{ij} = A_{ji}$　(14)

此时 A 为对称矩阵(symmetric matrix).

3. 幺正算符和正交算符

如果算符 U 满足

$$UU^+ = U^+ U = E \tag{15}$$

或　$U^+ = U^{-1}$　(16)

则称 T 是幺正算符(unitary operator)，式中 E 是恒等算符. 若空间 L 是实的，则(15)式化为

$$S\widetilde{S} = \widetilde{S}S = E \tag{17}$$

此时，S 叫正交算符(orthogonal operator). $\widetilde{S}$ 是 S 的转置算符.

幺正算符在矢量空间中由一组基矢变换到另一组基矢时起重要的作用.

如果原基矢 $\{\varphi_i(x)\}$ 是正交归一的，则在幺正算符作用下，变换后的基矢 $\{U\varphi_i(x)\}$ 也是正交归一的. 事实上，

$$(U\varphi_i, U\varphi_j) = (\varphi_i, U^+ U\varphi_j) = (\varphi_i, \varphi_j) = \delta_{ij} \tag{18}$$

其中用了幺正条件(15)式及正交归一化条件 § 6(8)式.

反之，如果原基矢$\{\varphi_i(x)\}$和变换后的基矢$\{U\varphi_i(x)\}$都是正交归一的，则变换算符 U 必是幺正算符. 事实上，由 § 6(7)式及

$$(\varphi_i,\varphi_j) = (U\varphi_i,U\varphi_j) = \delta_{ij}$$

立即可推出 U 具有如下性质：

$$\left.\begin{aligned}\sum_{i=1}^{n}U_{ij}^{*}U_{ik} = \delta_{jk}\\ \sum_{i=1}^{n}U_{ji}^{*}U_{ki} = \delta_{jk}\end{aligned}\right\}1 \leqslant j,k \leqslant n \tag{19a}$$

$$|\det U| = 1 \tag{19c}$$

这正是幺正矩阵的条件，即所有的行(列)互相正交且是归一化的. 用矩阵记法，上式可简写作

$$UU^{+} = U^{+}U = E$$

或
$$U^{+} = U^{-1}$$

把一正交归一基变为另一正交归一基的变换称为幺正变换(unitary transformation)，相应的算符是幺正算符 U. 因此，对于从一正交归一基变为另一正交归一基的表象变换，变换式 § 7(33)中的 S 应改为 U，于是 § 7(33)式改写成

$$T' = U^{-1}TU \tag{20}$$

或
$$T' = U^{+}TU, \qquad (U^{+} = U^{-1}) \tag{21}$$

这就是幺正的相似变换. 我们可以把幺正的相似变换叫做“坐标轴的转动”，或基矢的转动.

我们也可以把算符变换公式 § 7(20)式改写成

$$T' = UTU^{-1} = UTU^{+} \tag{22}$$

并看作是基不动而算符“转动”.

幺正变换具有重要的性质，它保持空间 L 中两矢量的标积不变，也不改变矢量的模. 事实上，设 $f(x)$和 $g(x)$是 L 中任意两个矢量，而 U 是幺正算符，则有

$$(Uf,Ug) = (f,U^{+}Ug) = (f,g) \tag{23}$$

若令 $f=g$，则得

$$\|Uf\|^{2} = (Uf,Uf) = (f,f) = \|f\|^{2} \tag{24}$$

由(24)式可见，对矢量的幺正变换只改变矢量所在空间 L 中的取向，不改变矢量的模，可看作是矢量的转动.

上述结果有二维空间中可得到简单的物理解释. 在图 2-2 中，我们画出了四个矢量 f, g, Uf 和 Ug，假定 U 是绕垂直于纸面的轴逆时针转 θ 角. 对于此图的特殊情况，(23)式是很明显的.

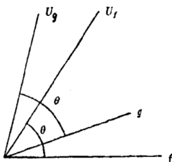


图 2-2

往后我们将主要地关心那些保持空间 L 的欧几里得性质(例如矢量的模和两矢量的标积不变)的变换. 旋转、反射和反演是此类变换的明显例子.

§9 投影算符

1. 投影算符

投影算符(projection operator)是一个重要的算符，它作用于矢量 $u \in L_n$，给出 u 沿某一给定基矢上的投影. 投影算符可写作

$$P_i = e_i(e_i, \quad) \tag{1}$$

式中的记号表示与 P_i 所作用的矢量取标积. 因此

$$\begin{aligned} P_i u &= e_i(e_i, u) = e_i(e_i, \sum_j a_j e_j) \\ &= e_i \sum_j a_j (e_i, e_j) = e_i \sum_j a_j \delta_{ij} = a_i e_i \end{aligned} \tag{2}$$

上式表示 u 沿 e_i 的投影.

值得注意，P_i 是线性算符，也是厄密算符，但不是幺正算符.

若我们把算符 P_i 再次作用于(2)式所得的矢量 $a_i e_i$，显然所得到的仍是同一矢量 $a_i e_i$，即

$$P_i(P_i u) = P_i(a_i e_i) = a_i e_i = P_i u \tag{3}$$

因为上式对所有 $u \in L_n$ 都成立，所以，可写成算符的形式

$$P_i^2 = P_i \tag{4}$$

上式是投影算符的一个重要性质，称为它的等幂性(idempotent property)．事实上，作用于希尔伯特空间 L_n 上的满足等式 $P^2=P$(即 $P^2u=Pu$，对所有的 $u\in L_n$)的任一算符 P 都称为投影算符．对(2)式求和容易证明

$$\sum_{i=1}^{n}P_i = E \tag{5}$$

式中 E 是恒等算符．

为了今后应用方便，我们用狄喇克记号来表示投影算符．设右矢空间的基矢是$\{|e_i\rangle\}$，左矢空间的基矢是$\{\langle e_i|\}$．定义投影算符为

$$P_i = |e_i\rangle\langle e_i| \tag{6}$$

P_i 作用到任意右矢$|\psi\rangle$上，得

$$P_i|\psi\rangle = |e_i\rangle\langle e_i|\psi\rangle \tag{7}$$

可以把式中$\langle e_i|\psi\rangle$看作是一个内积，它就是矢量$|\psi\rangle$在基矢$|e_i\rangle$上的投影．由(7)式我们可看出 P_i 就是投向基矢$|e_i\rangle$的投影算符，其意义与(2)式相同．等幂性也容易证明，因为

$$P_i^2 = P_iP_i = |e_i\rangle\langle e_i|e_i\rangle\langle e_i| = |e_i\rangle\langle e_i| = P_i \tag{8}$$

2．完全性关系

现在我们来求投影算符的一个重要性质，即所谓完全性关系．

设 n 维矢量空间 L_n 的正交归一基矢是$\{|e_i\rangle\}$，则任一右矢$|\psi\rangle$可用这组基矢展开：

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n}|e_i\rangle a_i \tag{9}$$

为求展开式中的系数 a_i，作标积

$$\langle e_j|\psi\rangle = \sum_i\langle e_j|e_i\rangle a_i = \sum_i\delta_{ji}a_i = a_j \tag{10}$$

将上式代入(9)式得

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{n}|e_i\rangle\langle e_i|\psi\rangle \tag{11}$$

式中$\langle e_i|\psi\rangle$是展开系数．我们可以把式中的$\sum_{i=1}^{n}|e_i\rangle\langle e_i|$看作是作用

到$|\psi\rangle$上的算符，由于上式对任何右矢$|\psi\rangle$都成立（只要$\{|e_i\rangle\}$是正交归一基），于是得到

$$\sum_{i=1}^{n}|e_i\rangle\langle e_i| = E \tag{12}$$

式中E是恒等算符. 上式可以理解为向整个矢量空间投影的投影算符$\sum_{i=1}^{n}P_i$，因此，任何矢量投影之后都不会发生改变.

因为上式是以$\{|e_i\rangle\}$的完备性为前提的，故称为完全性关系(completeness relation). 它在计算中非常有用. 例如可以在两个矢量的内积$\langle\varphi|\psi\rangle$中间插入一个恒等算符，利用完全性关系(12)式便有

$$\begin{aligned}\langle\varphi|\psi\rangle &= \langle\varphi|E|\psi\rangle \\ &= \sum_{i=1}^{n}\langle\varphi|e_i\rangle\langle e_i|\psi\rangle\end{aligned} \tag{13}$$

这就是狄喇克记号表示的 Parseval 恒等式.

§10 本 征 值 问 题

1. 算符的本征值

我们已经讨论过算符对基函数的作用：

$$T\varphi_i = \sum_{j=1}^{n}T_{ji}\varphi_j, \quad i = 1,2,\cdots,n \tag{1}$$

基函数集$\{\varphi_i\}$的选择不是唯一的，正因为如此，我们可以选择L中一组正交归一的基函数$\{\psi_i\}$，使等式(1)尽可能简化. 很明显，最简单的非平庸情况是(1)式右端只有第i项不为零，于是

$$T\psi_i = T_{ii}\psi_i = t_i\psi_i \tag{2}$$

式中$t_i = T_{ii}$. 满足(2)式的非零矢量称作算符T对应于本征值(eigenvalue)t_i的本征矢(eigenvector)或本征函数(eigenfunction). 求作用在希尔伯特空间上的某个算符的本征值和本征函数的问题，通常称为本征值问题(eigenvalue problem)，而方程(2)式常称为本征值方程(eigenvalue equation).

诸本征值不必各不相同，也就是说，两个或更多的本征矢可对应于同一本征值．此时，称这种本征矢是简并的(degenerate)．简并的本征矢所张子空间中每一矢量均可表为简并本征矢的线性组合 $|\psi\rangle=\sum_i a_i|\psi_i\rangle$，并且

$$\begin{aligned} T|\psi\rangle &= T\sum_i a_i|\psi_i\rangle \\ &= \sum_i a_i T|\psi_i\rangle \\ &= \sum_i a_i t|\psi_i\rangle \\ &= t\sum_i a_i|\psi_i\rangle = t|\psi_i\rangle \end{aligned}$$

属于同一本征值的全部独立的本征矢集，构成本征子空间．本征子空间的维数称为本征值的简并度(degeneracy)；换句话说，本征值的简并度就是属于该本征值的独立的本征矢的个数．

是否每个算符都有本征值和本征矢？若矢量空间 L 定义在实数域上，则作用在 L 上的每个算符未必都有本征值和本征矢．例如，考虑位置矢量的实二维空间中旋转 90°的操作，这个算符就没有本征矢，因为在此空间中没有一个非零矢量旋转 90°后变为自己的实数倍．

然而，若 L 是一复数域上的线性空间，则每个算符都有本征值和本征矢．如果每个本征值出现 n 次就算几个本征值，则本征值的个数正好等于空间 L 的维数．

一个算符的本征值的集合称为算符的本征值谱(spectrum)，或简称为它的谱．

现在我们来证明，在复空间中，厄密算符的本征值是实数．设 A 是厄密算符，$\psi(x)$是它的任一本征矢，a 为相应的本征值，本征方程为

$$A\psi(x) = a\psi(x) \tag{3}$$

作内积

$$(\psi,A\psi) = (\psi,a\psi) = a(\psi,\psi) \tag{4}$$

因为 A 是厄密算符，注意到 § 8(10)式，有

$$(\psi, A\psi) = (A\psi, \psi) = a^*(\psi, \psi) \tag{5}$$

比较(4)和(5)两式得

$$(a - a^*)(\psi, \psi) = 0 \tag{6}$$

注意到 $\psi \neq 0$，$(\psi, \psi) \neq 0$，故得

$$a = a^* \tag{7}$$

即证明了厄密算符的本征值是实数. 因为物理上可观察量都是实数，故在量子力学中表示可观察量的算符都是厄密算符.

在量子力学中，定义 $(\psi, A\psi)$ 为算符 A 的期望值(expectation value). 由以上证明可以看出，厄密算符 A 的期望值也是实数.

此外，可以证明，幺正算符的本征值的绝对值为 1. 设 U 为幺正算符，$\psi(x)$ 为它的任一本征矢，u 为相应的本征值，本征方程为

$$U\psi(x) = u\psi(x) \tag{8}$$

注意到 § 8(23)式有

$$(\psi, \psi) = (U\psi, U\psi) = (u\psi, u\psi) = u^*u(\psi, \psi)$$

由于 $(\psi, \psi) \neq 0$，由上式得

$$u^*u = 1$$

故

$$|u| = 1 \tag{9}$$

可以证明，幺正的相似变换不改变算符的本征值. 设算符的本征值是 t，本征方程为

$$T\psi = t\psi \tag{10}$$

作幺正的相似变换

$$\psi \to \psi' = U\psi$$

$$T \to T' = UTU^{-1}$$

式中 U 为幺正算符. 利用以上两式和(10)式，有

$$\begin{aligned} T'\psi' &= UTU^{-1} \cdot U\psi \\ &= UT\psi \\ &= Ut\psi \\ &= tU\psi = t\psi' \end{aligned} \tag{11}$$

比较(10)式和(11)式可知，幺正的相似变换不改变算符的本征值，

即算符 T 与 UTU^{-1}具有相同的本征值谱，但是它们具有不同的本征矢 ψ 和 $U\psi$. 这就是说，算符的本征值谱是算符的内禀性质.

2. 久期方程

现在我们来讨论如何求算符的本征值.

将
$$\psi = \sum_i a_i \psi_i \tag{12}$$
代入(10)式，可得到
$$\sum_{j=1}^{n} T_{ij} a_j = t a_i, \quad i = 1,2,\cdots,n \tag{13}$$
或写成矩阵形式：
$$\begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & \cdots & T_{1n} \\ T_{21} & T_{22} & \cdots & T_{2n} \\ \vdots & & & \\ T_{n1} & T_{n2} & \cdots & T_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = t \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \tag{14}$$
(13)式可化为
$$\sum_{j=1}^{n} (T_{ij} - t\delta_{ij}) a_j = 0, \quad i = 1,2,\cdots,n \tag{15}$$
此式是关于 a_i 的齐次线性方程组，有非零解的条件是其系数行列式为零：
$$\begin{vmatrix} T_{11} - t & T_{12} & \cdots & T_{1n} \\ T_{21} & T_{22} - t & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \\ T_{n1} & T_{n2} & \cdots & T_{nn} - t \end{vmatrix} = 0 \tag{16}$$
即
$$\det(T - tE) = 0 \tag{17}$$
此式称为久期方程(secular equation)或特征方程(characteristic equation). 原则上本征值可由解此方程得到. 对有限维空间，久期方程是一个 t 的 n 阶代数方程，它的 n 个根即为本征值 $t_i, i=1,2,\cdots,n$. 若出现重根，相应的本征值将是简并的，重根的数目就是简并度. 如果 n 无穷大，即对无限维空间(大多数物理问题中实际情况正是如此)，我们便面临一个解无穷阶行列式的问题. 然而，通常

我们只对算符本征值谱中几个最低本征值感兴趣，只要适当地选择子空间，就可以近似地把行列式化简为一个新的有限阶的行列式.

一旦用此方法确定了本征值，本征函数就不难求出，只要将本征值 t_i 代入(15)式，便可确定一组 a_i，再由(12)式确定 $\psi(x)$.

3. 对角化

由(2)式可以看出，若不用原来的函数集 $\{\varphi_i\}$ 而用函数集 $\{\psi_i\}$ 作为空间 L 的基，则表示算符 T 的矩阵是对角的(diagonal).

$$T_d = \begin{bmatrix} t_1 & & & & \\ & t_2 & & 0 & \\ & & \ddots & & \\ & 0 & & t_n & \\ & & & & \ddots \end{bmatrix} \tag{18}$$

且对角元素就是算符的本征值. 因此，一般说来，找算符的本征值等价于找一个适当的基，使在该基中算符的矩阵是对角矩阵. 换句话说，就是进行相似变换 U，使得变换后的 $T_d=U^{-1}TU$ 是对角的，从而求得算符的本征值. 这个过程称为算符(矩阵)的对角化. 在量子理论中，若我们能够把与可观察量对应的算符的矩阵表示对角化，则对角元即是可观察量可能的测量结果. 从线性代数中知道，使 T 对角化的相似变换算符 U 的列就是算符 T 的本征矢(特征向量).

厄密算符(或幺正算符)总是可以被幺正算符对角化(幺正的相似变换). 相反地，若算符既非厄密的，也非幺正的，则不可能找到一个基，在此基中算符的表示是对角的. 但是，算符的本征值和本征矢存在，因为久期方程总是有解的，例如算符

$$T = \begin{bmatrix} 1 & a \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

它的本征值是 $t_1=t_2=1$，本征矢是 $\psi_1=\psi_2=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$，但它不能被对角化.

§11 本征矢的正交归一性和完全性

厄密算符(或幺正算符)的本征矢具有重要的性质:它们互相正交并且能够归一化;空间 L_n 若是有限维的或者是可数无穷维的,则 n 个本征矢一定是线性无关的,因而它们可作为一组基矢张开空间,空间中的任何矢量都可用这些基矢展开.

1. 本征矢的正交性

首先我们证明,厄密算符或幺正算符属于不同本征值的本征矢互相正交. 设

$$A|\psi_i\rangle = a_i|\psi_i\rangle \tag{1}$$

(1)若 A 是厄密的,则有

$$\begin{aligned}\langle\psi_j|A|\psi_i\rangle &= \langle A\psi_j|\psi_i\rangle = \langle a_j\psi_j|\psi_i\rangle \\ &= a_j^*\langle\psi_j|\psi_i\rangle = a_j\langle\psi_j|\psi_i\rangle\end{aligned}$$

式中利用了本征值为实数的条件 $a_j=a_j^*$. 另一方面,我们有

$$\begin{aligned}\langle\psi_j|A|\psi_i\rangle &= \langle\psi_j|A\psi_i\rangle = \langle\psi_j|a_i\psi_i\rangle \\ &= a_i\langle\psi_j|\psi_i\rangle\end{aligned}$$

比较上面两式可得

$$(a_i - a_j)\langle\psi_j|\psi_i\rangle = 0$$

若 $a_i\neq a_j$,则得

$$\langle\psi_j|\psi_i\rangle = 0 \tag{2}$$

即证明了厄密算符属于不同本征值的本征矢相互正交. 注意到本征矢的归一化条件

$$\langle\psi_i|\psi_i\rangle = 1 \tag{3}$$

于是,本征矢的正交归一性可表为

$$\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij} \tag{4}$$

(2)若 A 是幺正算符 U,根据 §8(23)式我们有

$$\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \langle U\psi_i|U\psi_j\rangle = u_i^* u_j\langle\psi_i|\psi_j\rangle$$

注意到幺正算符的本征值的绝对值 $|u_i|=1$,或 $u_i^* u_i=1$,上式成为

$$\langle\psi_i|\psi_j\rangle=\frac{u_j}{u_i}\langle\psi_i|\psi_j\rangle$$

即
$$\left(1-\frac{u_j}{u_i}\right)\langle\psi_i|\psi_j\rangle=0$$

若 $u_i\neq u_j$，则得

$$\langle\psi_i|\psi_j\rangle=0$$

即证明了幺正算符属于不同本征值的本征矢相互正交.

2.本征矢的完全性

可以证明，在有限维空间 L_n 中，厄密算符的本征矢中有 n 个是线性无关的.

设厄密算符 A 的本征方程为

$$A|\psi\rangle=a|\psi\rangle \tag{5}$$

又设空间 L_n 取 $\{\varphi_i\}$ 为基，则有

$$|\psi\rangle=\sum_i|\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\psi\rangle=\sum_i b_i|\varphi_i\rangle \tag{6}$$

式中 $b_i=\langle\varphi_i|\psi\rangle$ 是展开系数，将上式代入(5)式便得到

$$\sum_{j=1}^{n}A_{ij}b_j=ab_i,\quad i=1,2,\cdots,n \tag{7}$$

或
$$\sum_{j=1}^{n}(A_{ij}-a\delta_{ij})b_j=0,\quad i=1,2,\cdots,n \tag{8}$$

上式是 b_j 的齐次线性方程组，有非零解的条件是

$$\det(A-aE)=0 \tag{9}$$

这就是熟知的久期方程，它是关于 a 的 n 次方程，有 n 个根.若每个根都不相同(相异实根)，则将各个根代入(8)式确定 b_j，再由(6)式确定对应的本征矢，从而得到 n 个线性无关的本征矢.若 n 个根中有些重根，例如 a_i 是 k 重根(k 重简并)，则 a_i 对应 k 个线性无关的简并本征矢，它们也许是不正交的，但总可以用施密特(Schmidt)正交归一化方法把这 k 个简并本征矢重新线性组合得到 k 个正交的本征矢.因此，不论本征值有无简并(久期方程有无重根)，A 的正交归一线性无关的本征矢的总数总是 n 个，即与空间维数相同，因此可以把这 n 个线性无关的正交归一本征矢作为基

矢，张成空间 L_n. 这样，空间 L_n 中任一矢量都可按这一组基矢 $\{|\psi_i\rangle\}$ 展开：

$$|f\rangle = \sum_{i=1}^{n} |\psi_i\rangle\langle\psi_i|f\rangle \tag{10}$$

厄密算符本征矢的这种性质，称为本征矢的完全性(completeness).完全性关系为

$$\sum_{i=1}^{n} |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = 1 \tag{11}$$

以上是有限维空间的情形.对于可数(分立)的无限维空间，我们直接推广有限维空间的结果而不研究因此而带来的数学问题.在这样的空间中，厄密算符通常有无限多个本征值和相应的无限多个本征矢.若将本征矢简记为 $|i\rangle$，$i=1,2,\cdots$，则正交归一化条件表为

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij}, \quad i,j = 1,2,\cdots \tag{12}$$

它们可以作为空间的一组正交归一的基矢，本征矢的完全性表为

$$|f\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} |i\rangle\langle i|f\rangle \tag{13}$$

完全性关系表为

$$\sum_{i=1}^{\infty} |i\rangle\langle i| = 1 \tag{14}$$

3. 连续谱情形

在量子力学中，还有一些厄密算符，它们具有连续的本征值谱，即其本征值以及与之相应的线性无关的本征矢的数目都是不可数的无限大，因而矢量空间是不可数无限维的.

这种情况当然会碰到更多的数学问题，我们不去讨论这些数学问题，只是把分立无限多本征矢的情况再作推广，采取最简捷的方法引入一些需要的关系式，放弃数学严格性的要求.

设 F 是厄密算符，它有连续的本征值和相应的本征矢 $|\lambda\rangle$，本征方程为

$$F|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle \tag{15}$$

我们把本征矢的完全性作为基本出发点.本征矢的完全性是物理

上的一个基本假设，在数学上是需要证明的.

我们假定，任一归一化的矢量$|\psi\rangle$都可以展开为这一组连续的本征矢$\{|\lambda\rangle\}$的迭加. 由于这些本征矢不是一个个分立的而是连续的，迭加应写成积分的形式

$$|\psi\rangle = \int d\lambda |\lambda\rangle\langle\lambda|\psi\rangle \tag{16}$$

上式对任何矢量$|\psi\rangle$均成立，所以这一组本征矢的完全性关系为

$$\int d\lambda |\lambda\rangle\langle\lambda| = 1 \tag{17}$$

在(16)式的展开中，$\langle\lambda|\psi\rangle$是系数，即矢量$|\psi\rangle$在基矢$|\lambda\rangle$上的分量，它是一个$\lambda$的连续函数，可写成$\psi(\lambda)$. 现在取一个固定的本征左矢$\langle\lambda'|$同(16)式两端作内积，得

$$\langle\lambda'|\psi\rangle = \int d\lambda \langle\lambda'|\lambda\rangle\langle\lambda|\psi\rangle$$

或写成

$$\psi(\lambda') = \int d\lambda \langle\lambda'|\lambda\rangle\psi(\lambda) \tag{18}$$

式中$\psi(\lambda')$是函数$\psi(\lambda)$在$\lambda=\lambda'$那一点的函数值. 把此式同δ函数的定义式

$$f(x_0) = \int dx \delta(x - x_0) f(x)$$

比较，可见应有

$$\langle\lambda'|\lambda\rangle = \delta(\lambda - \lambda') \tag{19}$$

上式与分立谱的正交归一化条件(4)式和(12)式对应.

上式表明，厄密算符A属于不同本征值的两个本征矢$|\lambda'\rangle$和$|\lambda\rangle$是正交的，但每一个本征矢的模并不是1，也不能乘以常数归一化为1，而是无限大. 这一点在物理上好像很自然，但在数学上却带来颇大的问题. 这种模为无限大的矢量不属于希尔伯特空间，因为矢量空间的定义要求一切矢量的模都必须存在，即必须是有限的. 幸好这种连续谱的本征矢同希尔伯特空间的任何矢量的内积都是有限的，使得问题还不那么严重. 事实上，

$$
\begin{aligned}
1 = \langle\psi|\psi\rangle &= \int \mathrm{d}\lambda \langle\psi|\lambda\rangle\langle\lambda|\psi\rangle \\
&= \int \mathrm{d}\lambda |\langle\lambda|\psi\rangle|^2
\end{aligned}
\tag{20}
$$

由此可看出，每一个$|\lambda\rangle$同每一个$|\psi\rangle$的内积都是有限的，是平方可积的. 在物理上所说的希尔伯特空间是把上述那种模为无限大，但同其他所有矢量的内积为有限的矢量包括了进去，这一空间比数学上严格定义的希尔伯特空间要大一些. 在量子力学中还会遇到这种情况，一个算符的本征值，在一个区域内是分立的，在另一区域内则是连续的，这时完全性关系写成

$$
\sum_i |\lambda_i\rangle\langle\lambda_i| + \int \mathrm{d}\lambda |\lambda\rangle\langle\lambda| = 1 \tag{21}
$$

而正交归一化条件为

$$
\left.
\begin{aligned}
\langle\lambda_i|\lambda_j\rangle &= \delta_{ij} \\
\langle\lambda'|\lambda\rangle &= \delta(\lambda - \lambda')
\end{aligned}
\right\}
\tag{22}
$$

对于上面讨论的本征值为分立、连续或二者兼有的情况，我们作一般性推导时往往不加区别；有时写成取和的形式，有时写成积分的形式，其具体含义根据本征值的分立或连续情况对公式的含义作相应的理解.

§ 12　矩阵的直和与直积

1. 矩阵的直和

m 阶方阵 $A \equiv [A_{ij}]$ 与 n 阶方阵 $B \equiv [B_{ij}]$ 的直和(direct sum)为由下式定义的 $m+n$ 阶方阵 C:

$$
C = A \oplus B = \begin{bmatrix} A & 0 \\ 0 & B \end{bmatrix}
$$

$$
=\left[\begin{array}{cccc:cccc}
A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1m} & & & & \\
A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2m} & & 0_1 & & \\
\vdots & & & & & & & \\
A_{m1} & A_{m2} & \cdots & A_{mm} & & & & \\
\hdashline
 & & & & B_{11} & B_{12} & \cdots & B_{1n} \\
 & 0_2 & & & B_{21} & B_{22} & \cdots & B_{2n} \\
 & & & & \vdots & & & \\
 & & & & B_{n1} & B_{n2} & \cdots & B_{nn}
\end{array}\right] \tag{1}
$$

式中 0_1 和 0_2 分别是 m 行 n 列与 n 行 m 列零矩阵，符号⊕代表直和. 这一概念很容易推广到多个矩阵的直和. 例如矩阵

$$
A = a, \quad B = \begin{bmatrix} b & c \\ d & e \end{bmatrix}, \quad c = \begin{bmatrix} f & g & h \\ i & j & k \\ l & m & n \end{bmatrix}
$$

的直和是下面的六阶方阵：

$$
D = A \oplus B \oplus C = \left[\begin{array}{c:cc:ccc}
a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\hdashline
0 & b & c & 0 & 0 & 0 \\
0 & d & e & 0 & 0 & 0 \\
\hdashline
0 & 0 & 0 & f & g & h \\
0 & 0 & 0 & i & j & k \\
0 & 0 & 0 & l & m & n
\end{array}\right] \tag{2}
$$

这类矩阵，在沿主对角线的方块中有非零元素而在其余地方的元素为零，称为分块对角矩阵. 它有如下重要性质：

$$
\det D = (\det A)(\det B)(\det C) \tag{3}
$$

$$
\mathrm{Tr} D = \mathrm{Tr} A + \mathrm{Tr} B + \mathrm{Tr} C, \tag{4}
$$

$$
(A_1 \oplus B_1)(A_2 \oplus B_2) = (A_1 A_2) \oplus (B_1 B_2) \tag{5}
$$

其中 A_1 和 A_2 都是 n 阶方阵，B_1 和 B_2 都是 m 阶方阵.

2. 矩阵的直积

L 行 M 列的矩阵 $A \equiv [A_{lm}]$ 与 P 行 Q 列的矩阵 $B \equiv [B_{pq}]$ 的直积(direct product)与通常的矩阵乘法不同，它是一个 $I(=LP)$ 行 $J(=MQ)$ 列的矩阵 C：

$$C = A \otimes B = \begin{bmatrix} A_{11}B & A_{12}B & \cdots & A_{1M}B \\ A_{21}B & A_{22}B & \cdots & A_{2M}B \\ \vdots & & & \\ A_{L1}B & A_{L2}B & \cdots & A_{LM}B \end{bmatrix} \tag{6}$$

其中“矩阵元”$A_{lm}B$ 是 P 行 Q 列的矩阵

$$A_{lm}B = \begin{bmatrix} A_{lm}B_{11} & A_{lm}B_{12} & \cdots & A_{lm}B_{1Q} \\ A_{lm}B_{21} & A_{lm}B_{22} & \cdots & A_{lm}B_{2Q} \\ \vdots & & & \\ A_{lm}B_{P1} & A_{lm}B_{P2} & \cdots & A_{lm}B_{PQ} \end{bmatrix} \tag{7}$$

将(7)式代入(6)式就得到

$$C = \begin{bmatrix} A_{11}B_{11} & A_{11}B_{12} & \cdots & A_{11}B_{1Q} & A_{12}B_{11} & \cdots & A_{12}B_{1Q} & \cdots & A_{1M}B_{1Q} \\ A_{11}B_{21} & A_{11}B_{22} & \cdots & A_{11}B_{2Q} & A_{12}B_{21} & \cdots & A_{12}B_{2Q} & \cdots & A_{1M}B_{2Q} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{11}B_{P1} & A_{11}B_{P2} & \cdots & A_{11}B_{PQ} & A_{12}B_{P1} & \cdots & A_{12}B_{PQ} & \cdots & A_{1M}B_{PQ} \\ A_{21}B_{11} & A_{21}B_{12} & \cdots & A_{21}B_{1Q} & A_{22}B_{11} & \cdots & A_{22}B_{1Q} & \cdots & A_{2M}B_{1Q} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{21}B_{P1} & A_{21}B_{P2} & \cdots & A_{21}B_{PQ} & A_{22}B_{P1} & \cdots & A_{22}B_{PQ} & \cdots & A_{2M}B_{PQ} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{L1}B_{P1} & A_{L1}B_{P2} & \cdots & A_{L1}B_{PQ} & A_{L2}B_{P1} & \cdots & A_{L2}B_{PQ} & \cdots & A_{LM}B_{PQ} \end{bmatrix} \tag{8}$$

观察(8)式可见,C 的行列均可用双指标标记,即

$$C_{lp,mq} = A_{lm}B_{pq} \tag{9}$$

其中双指标(lp)记 C 的行,双指标(mq)记 C 的列. 例如行的双指标 lp 中第一个指标 l 是 A 的行,第二个指标 p 是 B 的行.

这一较为复杂的记法可通过一个例子弄明白. 矩阵

$$A = \begin{matrix} & (1) & (2) & (3) \\ (1) & a & b & c \\ (2) & d & e & f \end{matrix}$$

$$B = \begin{matrix} & (1) & (2) \\ (1) & h & r \\ (2) & k & s \\ (3) & l & t \end{matrix}$$

的直积是 6 阶矩阵

$$C = A \otimes B = \begin{matrix} & (11) & (12) & (21) & (22) & (31) & (32) \\ (11) & ah & ar & bh & br & ch & cr \\ (12) & ak & as & bk & bs & ck & cs \\ (13) & al & at & bl & bt & cl & ct \\ (21) & dh & dr & eh & er & fh & fr \\ (22) & dk & ds & ek & es & fk & fs \\ (23) & dl & dt & el & et & fl & ft \end{matrix}$$

注意矩阵 C 的行和列标记方式不同. 如 C 的第三行的指标是(13)而第三列的指标是(21). C 的元素为,例如

$$C_{21,31} = fh = A_{23}B_{11}$$

与(9)式一致.

现在我们重新给 C 的行与列编号,分别使行和列的双指标与一个数字等同,即

$$(lp) \to i, \quad (mq) \to j, \quad \text{其中 } 1 \leqslant i \leqslant I, \quad 1 \leqslant j \leqslant J$$

这样便得到行列式的一般标记法

$$C_{ij} \equiv C_{lp,mq} \tag{10}$$

在一般情况下,双指标与单指标可以这样等同起来,令

$$i = (l-1)P + p, \quad j = (m-1)Q + q \tag{11}$$

如此就有

$$C_{lp,mq} \equiv C_{ij} = C_{(l-1)P+p,\ (m-1)Q+q} \tag{12}$$

例如上例中 $C_{21,31} = C_{45}$,而 fh 正是矩阵 C 的第 4 行第 5 列元素.

直积的概念也可以推广到多个矩阵的情形. 对取直积的诸矩阵的阶没有什么限制.

矩阵的直积具有下列重要性质:

(1)求直积对矩阵的加法运算满足分配律:

$$A \otimes (C + D) = A \otimes C + A \otimes D \tag{13}$$

(2)求矩阵直积的运算满足结合律：

$$A \otimes (B \otimes C) = (A \otimes B) \otimes C \tag{14}$$

(3)如 $F=A\otimes B\otimes C\cdots$，则

$$\mathrm{Tr}F = (\mathrm{Tr}A)(\mathrm{Tr}B)(\mathrm{Tr}C)\cdots \tag{15}$$

(4)
$$(A_1 \otimes B_1)(A_2 \otimes B_2) = (A_1A_2) \otimes (B_1B_2) \tag{16}$$

(5)
$$\begin{aligned}&(AB) \otimes (AB) \otimes (AB)\\ &=(AB) \otimes ((A \otimes A)(B \otimes B))\\ &=(A \otimes A \otimes A)(B \otimes B \otimes B)\end{aligned} \tag{17}$$

(6)若方阵 A 和 B 的本征方程为

$$Ax_i = \lambda_i x_i, \quad By_i = \mu_i y_i$$

则
$$(A \otimes B)(x_i \otimes y_i) = \lambda_i\mu_i(x_i \otimes y_i) \tag{18}$$

例如(15)式证明如下：

$$\mathrm{Tr}F = \mathrm{Tr}(A \otimes B) = \sum_{i,j}(A \otimes B)_{ij,ij}$$

$$= \sum_{i,j} A_{ii}B_{jj} = (\mathrm{Tr}A)(\mathrm{Tr}B)$$

我们将会看到，矩阵直和与直积的概念往后非常有用.

第三章　有限群的表示理论

在前面两章中，我们引入了两个数学概念——群和希尔伯特空间．现在我们要把这两个概念结合起来并考察群元素与希尔伯特空间的变换(算符)之间的联系，即研究群的表示理论．虽然数学家往往对抽象群理论的形式发展有更大的兴趣，物理学家却发现群的表示理论在量子物理和其他物理分支中有直接的应用．本章只限于研究有限群，大部分结果对无限群情况或者同样成立，或者很容易修正．下一章讨论连续群及其表示．

§1　群表示的定义

1．群表示的定义

设 $G=\{E,A,B,C,\cdots\}$ 为 g 阶群．

如果我们能够在希尔伯特空间 L 中找到线性算符的集合 $T=\{T(E),T(A),T(B),T(C),\cdots\}$，具有如下的性质：

$$\left.\begin{aligned} T(A)T(B) &= T(AB) \\ T(E) &= E \end{aligned}\right\} \tag{1}$$

就是说，若在群 G 中存在

$$AB = C \tag{2}$$

在集合 T 中存在

$$\left.\begin{aligned} T(A)T(B) &= T(C) \\ T(E) &= E \end{aligned}\right\} \tag{3}$$

就称算符集合 T 构成群 G 在空间 L 的一个"表示"(representation)．这样，群的表示就是群元素 $A,B,C,\cdots$ 分别到希尔伯特空间 L 的算符 $T(A),T(B),T(C),\cdots$ 的"映象"(mapping)．

如果算符 $T(E),T(A),T(B),\cdots$ 与群元素 $E,A,B,\cdots$ 之间存在

一一对应关系(同构对应),则称表示 T 是群 G 的忠实表示(faithful representation). 这时,算符集合 T 构成空间 L 的一个群. 所以,也可以说,与群 G 同构的算符群 T 是 G 在空间 L 的一个忠实表示.

一般地,映象可能是多一对应的,即若干个群元素被同一算符对应(同态对应),则称表示 T 是非忠实的(unfaithful). 如果所有群元素都被单位算符(恒等算符) E 对应,则称表示 T 为恒等表示. 除一阶群外,恒等表示都是非忠实表示.

在非忠实表示(同态对应)的情况下,算符集合 T 中各元素未必全不相同. 若 T 中每个不同的算符只取一次,则所得集合是一个群,此群与群 G 同态.

上面讨论的空间 L 称为表示空间(representation space). 我们将表示空间的维数定义为表示的维数. 例如表示空间的维数为 n,就说表示是 n 维的.

2. 矩阵表示

实际上,人们常常用相对于某给定基的矩阵来表示算符. 如果在空间 L 中选取 $\{\varphi_i\}$ $(i=1,2,3,\cdots,n)$ 作为基,则根据第二章 §6 (7)式,有

$$T(A)\varphi_i = \sum_j T_{ji}(a)\varphi_j \tag{4}$$

式中矩阵元由下式给出:

$$T_{ji}(A) = (\varphi_j, T(A)\varphi_i) \tag{5}$$

具有矩阵元 $T_{ji}(A)$ 的矩阵 $[T(A)]$ 就是算符 $T(A)$ 对基 $\{\varphi_i\}$ 的一个表示. 对群的每一个元素,都有相应于(4)和(5)的式子成立. 于是,具有矩阵元 $T_{ji}(B)$, $T_{ji}(C)$, $\cdots$ 的矩阵 $[T(B)]$, $[T(C)]$, $\cdots$ 就分别是算符 $T(B)$, $T(C)$, $\cdots$ 对基 $\{\varphi_i\}$ 的一个表示.

今后我们用与算符相同的符号记矩阵. 可以证明,矩阵 $T(E)$, $T(A)$, $T(B)$, $\cdots$ 的集合 T 构成群 G 的一个矩阵表示(matrix representation),即下列矩阵方程成立:

$$T(A)T(B) = T(AB) \tag{6}$$

事实上,

$$
\begin{aligned}
T(A)T(B)\varphi_i &= T(A)\sum_{j=1}^{n}T_{ji}(B)\varphi_j \\
&= \sum_j\sum_k T_{ji}T_{kj}(A)\varphi_k \\
&= \sum_k\Big(\sum_j T_{kj}(A)T_{ji}(B)\Big)\varphi_k
\end{aligned}
$$

另一方面,根据(1)式有

$$
\begin{aligned}
T(A)T(B)\varphi_i &= T(AB)\varphi_i \\
&= \sum_k T_{ki}(AB)\varphi_k
\end{aligned}
$$

比较上面两式得

$$
\begin{aligned}
T_{ki}(AB) &= \sum_j T_{kj}(A)T_{ji}(B) \\
&= (T(A)T(B))_{ki} \qquad (7)
\end{aligned}
$$

其矩阵表示式就是(6)式. T 中矩阵的阶就是表示的维数.

若在群 G 中 $AB=C$,则由(6)式有

$$
T(A)T(B) = T(C) \qquad (6')
$$

若 $E\leftrightarrow T(E)$, $A\leftrightarrow T(A)$, $B\leftrightarrow T(B)$, …,即矩阵群 T 与群 G 同构,则表示是忠实的;若群元素与表示矩阵的对应关系是多对一的,则表示是非忠实的.换句话说,若一个群的全部元素的表示矩阵各不相同,则这些矩阵的集合是群的一个忠实表示;若 T 的矩阵并非各不相同,则表示是非忠实的.

每个群至少有一个忠实表示.

〔例 1〕矩阵群 $T=\left\{\begin{bmatrix}1&0\\0&1\end{bmatrix},\begin{bmatrix}0&1\\-1&0\end{bmatrix},\begin{bmatrix}-1&0\\0&-1\end{bmatrix},\begin{bmatrix}0&-1\\1&0\end{bmatrix},\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix},\begin{bmatrix}-1&0\\0&1\end{bmatrix},\begin{bmatrix}0&-1\\-1&0\end{bmatrix},\begin{bmatrix}0&1\\1&0\end{bmatrix}\right\}$ 是 C_{4v} 群的一个忠实表示.

设群 T 记为 $T\equiv\{E,T(A),T(B),T(C),T(D),T(F),T(G),T(H)\}$,其乘法表容易构造如下.

表 1

G_i \ G_j	E	$T(A)$	$T(B)$	$T(C)$	$T(D)$	$T(F)$	$T(G)$	$T(H)$
E	E	$T(A)$	$T(B)$	$T(C)$	$T(D)$	$T(F)$	$T(G)$	$T(H)$
$T(C)$	$T(C)$	E	$T(A)$	$T(B)$	$T(H)$	$T(G)$	$T(D)$	$T(F)$
$T(B)$	$T(B)$	$T(C)$	E	$T(A)$	$T(F)$	$T(D)$	$T(H)$	$T(G)$
$T(A)$	$T(A)$	$T(B)$	$T(C)$	E	$T(G)$	$T(H)$	$T(F)$	$T(D)$
$T(D)$	$T(D)$	$T(H)$	$T(F)$	$T(G)$	E	$T(B)$	$T(C)$	$T(A)$
$T(F)$	$T(F)$	$T(G)$	$T(D)$	$T(H)$	$T(B)$	E	$T(A)$	$T(C)$
$T(G)$	$T(G)$	$T(D)$	$T(H)$	$T(F)$	$T(A)$	$T(C)$	E	$T(B)$
$T(H)$	$T(H)$	$T(F)$	$T(G)$	$T(D)$	$T(C)$	$T(A)$	$T(B)$	E

若群 C_{4v}的元素与矩阵群 T 的元素一一对应如下：

$$\left.\begin{array}{l} E\leftrightarrow E,C_4\leftrightarrow T(A),C_4^2\leftrightarrow T(B),C_4^3\leftrightarrow T(C) \\ m_x\leftrightarrow T(D),m_y\leftrightarrow T(F),\sigma_\mu\leftrightarrow T(G),\sigma_\nu\leftrightarrow T(H) \end{array}\right\} \tag{8}$$

则矩阵群 T 的乘法表与群 C_{4v}的乘法表(见第一章表4)相同，故矩阵群 T 与 C_{4v}群同构，即 T 是 C_{4v}群的一个忠实表示，是二维表示.

〔例2〕二维方阵

$$\left.\begin{array}{l} T(E)=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix},\quad T(A)=\begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}, \\ T(B)=\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix},\quad T(C)=\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2}\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix}, \\ T(D)=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix},\quad T(F)=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2}\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix} \end{array}\right\} \tag{9}$$

的集合构成的矩阵群 T 是置换群 S_3的一个忠实表示.

容易构造矩阵群 T 的乘法表如下：

表2

G_i \ G_j	E	$T(A)$	$T(B)$	$T(C)$	$T(D)$	$T(F)$
E	E	$T(A)$	$T(B)$	$T(C)$	$T(D)$	$T(F)$
$T(A)$	$T(A)$	E	$T(F)$	$T(D)$	$T(C)$	$T(B)$
$T(B)$	$T(B)$	$T(D)$	E	$T(F)$	$T(A)$	$T(C)$
$T(C)$	$T(C)$	$T(F)$	$T(D)$	E	$T(B)$	$T(A)$
$T(D)$	$T(D)$	$T(B)$	$T(C)$	$T(A)$	$T(F)$	E
$T(F)$	$T(F)$	$T(C)$	$T(A)$	$T(B)$	E	$T(D)$

若群 S_3的元素与矩阵群 T 的元素一一对应如下：

$$\left.\begin{array}{lll} E\leftrightarrow T(E), & P_1\leftrightarrow T(A), & P_2\leftrightarrow T(B) \\ P_3\leftrightarrow T(C), & P_4\leftrightarrow T(F), & P_5\leftrightarrow T(D) \end{array}\right\} \tag{10}$$

则矩阵群 T 的乘法表与群 S_3的乘法表(见第一章表6)相同，故矩阵群 T 与群 S_3同构，即 T 是群 S_3的一个忠实表示，是二维表示.

〔例3〕例2给出的二维方阵的集合也是群 D_3的一个二维的忠实表示，一一对应关系为：

$$\left.\begin{array}{lll} E\leftrightarrow T(E), & R_a\leftrightarrow T(A), & R_b\leftrightarrow T(B) \\ R_c\leftrightarrow T(C), & R_1\leftrightarrow T(D), & R_2\leftrightarrow T(F) \end{array}\right\} \tag{11}$$

〔例4〕求群 D_3的三维忠实表示.

在普通三维空间中，选取 e_x,e_y 和 e_z 为基矢，e_z 垂直纸面向上.

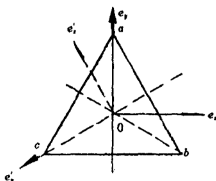


图 3-1

群元素 D 是绕 z 轴逆时针方向旋转120°，因而有

$$
\left.
\begin{aligned}
T(D)e_x &= e'_x \\
&= \cos\frac{2}{3}\pi e_x + \sin\frac{2}{3}\pi e_y \\
&= -\frac{1}{2}e_x + \frac{\sqrt{3}}{2}e_y \\
T(D)e_y &= e'_y \\
&= -\sin\frac{2}{3}\pi e_x + \cos\frac{2}{3}\pi e_y \\
&= -\frac{\sqrt{3}}{2}e_x - \frac{1}{2}e_y \\
T(D)e_z &= e'_z = e_z
\end{aligned}
\right\} \tag{12}
$$

根据(5)式有

$$T_{ji}(D) = (e_j, T(D)e_i)$$

注意到基矢的正交归一化条件$(e_j,e_j)=\delta_{ij}$，于是得

$$T_{11}(D) = (e_x, T(D)e_x) = (e_x, -\frac{1}{2}e_x + \frac{3}{2}e_y) = -\frac{1}{2}$$

$$T_{21}(D) = (e_y, T(D)e_x) = (e_y, -\frac{1}{2}e_x + \frac{2}{3}e_y) = \frac{\sqrt{3}}{2}$$

$$T_{31}(D) = (e_y, T(D)e_x) = 0$$

$$T_{12}(D) = (e_x, T(D)e_y) = (e_x, -\frac{\sqrt{3}}{2}e_x - \frac{1}{2}e_y) = -\frac{\sqrt{3}}{2}$$

$$T_{22}(D) = (e_y, T(D)e_y) = -\frac{1}{2}$$

$$T_{32}(D) = (e_z, T(D)e_y) = 0$$

$$T_{13}(D) = (e_x, T(D)e_z) = (e_x, e_y) = 0$$

$$T_{23}(D) = (e_y, T(D)e_z) = 0$$

$$T_{33}(D) = (e_z, T(D)e_z) = 1$$

从而得到
$$
T(D) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}
$$

相似的方法和步骤可求其余矩阵：

$$
\left.\begin{aligned}
&T(F)=\begin{bmatrix}-\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}, T(A)=\begin{bmatrix}-1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{bmatrix},\\
&T(B)=\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & -1\end{bmatrix}, T(C)=\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0\\ 0 & 0 & -1\end{bmatrix},\\
&T(E)=\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}
\end{aligned}\right\} \tag{13}
$$

§2 等价表示

设算符 $T(E),T(A),T(B),\cdots$ 集合 T 是群 G 在空间 L 中的一个表示．如果算符 S 是从空间 L 到相同维数的另一空间 L' 的映射，则根据第二章§7(20)式有

$$
\left.\begin{aligned}
T'(A)&=ST(A)S^{-1}\\
T'(B)&=ST(B)S^{-1}\\
&\vdots
\end{aligned}\right\} \tag{1}
$$

上式左边的算符作用在空间 L' 上，并且它们的集合 T 也构成群 G 在空间 L' 中的一个表示．事实上，

$$
\begin{aligned}
T'(A)T'(B)&=ST(A)S^{-1}ST(B)S^{-1}\\
&=ST(A)T(B)S^{-1}\\
&=ST(AB)S^{-1}\\
&=T'(AB)
\end{aligned}
$$

上式表明，$T'(E),T'(A),T'(B),\cdots$，的集合 T' 确是群 G 的一个表示．作为特殊情况，空间 L' 和空间 L 可以是相同的空间．我们称

T'和 T 这两个表示是"等价"的(equivalent)表示.

容易证明,如果 T'与 T 等价,T''与 T'等价,则 T''与 T 等价.

对于矩阵表示,由基的改变可产生等价的矩阵表示.设基$\{\varphi_i\}$在算符 S 作用下变换为$\{\varphi_i'\}$,则算符 T 在旧基和新基中的矩阵$[T_{ij}]$和$[T'_{ij}]$由第二章§7(33)式联系:

$$T' = S^{-1}TS \tag{2}$$

如果 $T(A)T(B)=T(AB)$,则同样可证明 $T'(A)T'(B)=T'(AB)$,即如果 T 是群 G 的表示,则 T'也是群 G 的表示.

我们把由相似变换(1)式或(2)式相联系的两个表示称为等价表示.物理上把一切互相等价的表示认为是相同的.

群的两个互不等价的表示称为不等价表示(inequivalent representation)或不同的表示(distinct representation).

(1)式和(2)式中 S 与 S^{-1}互换位置是由于(1)式描述新旧算符间的联系,而(2)式描述同一算符对不同基的矩阵之间的联系.

§3 幺正表示定理

可以证明,有限群的任何非奇异表示等价于一个幺正表示.就是说,对于给定的表示 T,能够找到一个算符 S,使得其等价表示 T'是幺正的.

设 g 阶群的一个表示为 $T=\{T(A_1),T(A_2),\cdots,T(A_\mu),\cdots T(A_g)\}$,作算符

$$S = \{\sum_\mu T^+(A_\mu)T(A_\mu)\}^{1/2} \tag{1}$$

首先证明,对于固定的群元素,例如 A_1,有

$$\begin{aligned} T^+(A_1)S^2T(A_1) &= \sum_\mu T^+(A_1)T^+(A_\mu)T(A_\mu)T(A_1) \\ &= \sum_\mu T^+(A_\mu A_1)T(A_\mu A_1) \\ &= \sum_\nu T^+(A_\nu)T(A_\nu) = S^2 \end{aligned} \tag{2}$$

式中，$A_\mu A_1 = A_\nu$，当 A_μ 遍及群元素时，A_ν 亦遍及群元素．其次，用 $T^{-1}(A_1)S^{-1}$右乘上式两端，用 S^{-1}左乘上式两端，得

$$S^{-1}T^+(A_1)S = ST^{-1}(A_1)S^{-1}$$

利用 S 的厄密性 $S^+ = S$，$(S^{-1})^+ = S^{-1}$，及 $(ABC)^+ = C^+B^+A^+$，$(ABC)^{-1} = C^{-1}B^{-1}A^{-1}$，则上式变成

$$(ST(A_1)S^{-1})^+ = (ST(A_1)S^{-1})^{-1}$$

令
$$ST(A_1)S^{-1} = T'(A_1) \tag{3}$$

则
$$(T'(A_1))^+ = (T'(A_1))^{-1} \tag{4}$$

对群的其余元素 $A_2, A_3, \cdots$ 亦有相同的关系式成立．(4)式是幺正性条件，可见与表示 T 等价的表示 T'（由(3)式联系）是幺正表示(unitary representation)．

幺正表示定理又称为 Maschke 定理．

既然群的一切非奇异表示都等价于幺正表示，以后只讨论幺正表示即可．

§4 不变子空间和可约表示

1. 不变子空间

若矢量空间 L_m 的每一矢量都被包含在另一矢量空间 L_n 中，则称 L_m 为 L_n 的子空间．当 $m<n$ 时，即当 L_m 的矢量不能穷尽 L_n 时，称 L_m 为 L_n 的真子空间(proper subspace)．当 $m=n$ 时，L_n 是其自身的子空间，但当然不是真子空间．

如果在群 G 的变换下，矢量空间 L_n 是封闭的，则有可能存在一真子空间 L_m，它在 G 下也是不变的，即可能存在 L_m 空间，其中任意矢量 u 受 $T(A_i)$作用后所得矢量 $u' = T(A_i)u$ 仍属 L_m，则称这样的子空间 L_m 为在群 G 下空间 L_n 的不变子空间(invarant supspace)，并称空间 L_n 在群 G 下是可约的．

从矢量空间 L 中的任一矢量出发，如何生成不变子空间呢？设 u 是 L 中的任意矢量，将 g 阶群 G 的 g 个元素 $A_1, A_2, \cdots$生成的 g 个算符 $T(A_1), T(A_2), \cdots$分别作用于 u 上，便得到 g 个矢量

$$u_{A_1}=T(A_1)u,\quad u_{A_2}=T(A_2)u,\quad \cdots \tag{1}$$

诸矢量 $u_{A_1},u_{A_2},\cdots$的集合便可张成 L 的不变子空间. 如果所有的矢量 $u_{A_1},u_{A_2},\cdots$是线性无关的,则它们可组成群的 g 维表示的基,并张成 L 的 g 维不变空间. 一般地,诸矢量 $u_{A_1},u_{A_2},\cdots$不是线性无关的,但它们的线性组合总可能构造 $s(s\leqslant g)$个线性无关的矢量作为基矢. 如果这些基矢不正交,可用 Schmidt 方法使之正交归一化. 以这些基矢张成的空间,就是 L 的 S 维不变子空间.

例如,以六个函数 $\psi_1=x^2,\psi_2=y^2,\psi_3=z^2,\psi_4=yz,\psi_5=zx,\psi_6=xy$(它们不正交,但彼此线性无关)作为基的六维函数空间中,若将群 D_3的六个元素生成的算符分别作用于任一函数例如 $\psi_1=x^2$上,则有

$$T(E)\psi_1=x^2$$

$$T(A)\psi_1=x^2$$

$$T(B)\psi_1=\frac{x^2}{4}+\frac{3}{4}y^2-\frac{\sqrt{3}}{2}xy$$

$$T(C)\psi_1=\frac{1}{4}x^2+\frac{3}{4}y^2+\frac{\sqrt{3}}{2}xy$$

$$T(D)\psi_1=\frac{1}{4}x^2+\frac{3}{4}y^2-\frac{\sqrt{3}}{2}xy$$

$$T(F)\psi_1=\frac{1}{4}x^2+\frac{3}{4}y^2+\frac{\sqrt{3}}{2}xy$$

容易看出,生成的函数不是全部线性无关的,三个函数 x^2,y^2和 xy 将提供一个基(虽然它不是正交归一的),从而我们得到一个三维子空间.

2. 可约表示

设 L 对于由群元素 A_i 生成的变换 $T(A_i)$是不变的空间. 如果 L_1是 L 的不变子空间,而且 L_1的正交补空间 L_2也是不变的,则称表示 T 是可约的(reducible);如果不存在这样的子空间,即空间 L 不再含有不变子空间时,则称表示是不可约的(irreducible).

可见,表示的可约性(reducibility)是与整个空间中真不变子空

间的存在相连系的.

在可约性的定义中,子空间 L_1和它的正交补空间 L_2两者都应是不变的这点很重要. 幸好,如果表示算符 $T(A_i)$是幺正的,则 L_1的不变性就意味着 L_2的不变性. 而上面我们证明过任何非奇异表示等价于一个幺正表示,所以,我们只要知道 L 的子空间 L_1是不变的,则表示 T 就是可约的了.

现在我们可以把一个空间 L 分解为它的不变的不可约的子空间 L_q 之和,写作

$$L = L_1 + L_2 + L_3 \cdots \tag{2}$$

显然,这种分解不是唯一的,其中每一个 L_q 在变换 $T(A_i)$下是不变的、不可约的. 相应地,表示的约化可表为

$$T(A_i) = T^{(1)}(A_i) \oplus T^{(2)}(A_i) \oplus T^{(3)}(A_i) \oplus \cdots \tag{3}$$

其中,$T^{(q)}(A_i)$是子空间 L_q 中的不可约表示. 上式可理解为群 G 在空间 L 中的一个表示可约化为在各个不变子空间 L_q 中的不可约表示 $T^{(q)}(A_i)$的直和.

一切可约表示都可约化(分解)为若干不可约表示的直和.

借助于矩阵,如果适当选取基矢的次序,使得属于 L_1的基矢排在前面,跟着是属于 L_2的基矢,等等,那么,矩阵将出现分块对角形式

$$\begin{bmatrix} \ddots & & & 0 \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \ddots \end{bmatrix} \tag{4}$$

因此,可约表示亦可如下定义:如果群 G 的表示矩阵可以通过一个幺正的相似变换化为分块对角形式的矩阵,则表示是可约的;而不可约表示则不能通过相似变换使之变换成分块对角形式的矩阵.

在可约表示中,某一个不可约表示可能出现不止一次,用 a_1, a_2,…表示出现次数,则矩阵约化可表为

$$T = a_1 T^{(1)} \oplus a_2 T^{(2)} \oplus \cdots = \dot{\sum_i} a_i T^{(i)} \tag{5}$$

式中总和 $\dot{\sum_i}$ 上的圆点表示直和的意思.

下面举一个可约表示的例子. 群 D_3的三维表示 § 1(13)式是可约的. 显然,它们是形如

$$\begin{bmatrix} \because & 0 \\ 0 & \cdot \end{bmatrix}$$

的分块对角矩阵,即

$$T = T^{(3)} \oplus T^{(2)} \tag{6}$$

其中 $T^{(3)}$是二维不可约表示,即 § 1(9)式,而 $T^{(2)}$则是一维表示{1,1,1,−1,−1,−1},它是群 D_3的一个非忠实表示,对应关系是

$$E, D, F \to 1, \qquad A, B, C \to -1$$

既然一切可约表示都可约化为若干不可约表示的直和,因此研究群表示只要研究不可约表示. 所以,我们今后关心的是:一个群有哪些不等价不可约的表示(inequivalent irreducible representation).

§ 5 舒尔引理

1905年,舒尔推证了两条重要定理,名为舒尔引理(Schur's lummas),它们对研究群的不可约表示非常有用,由它们可以导出不可约表示的正交性定理.

我们假定,表示空间是复矢量空间.

1. 舒尔引理1

若 T 是群 G 的一个不可约表示,若有一矩阵 P 与 T 的所有矩阵对易,即

$$T(A_i)P = PT(A_i), \quad 对所有\ A_i \in G \tag{1}$$

则 P 必为一常数矩阵,即 P 是单位矩阵的常数倍 $P = cE$(c 是一数).

〔证明〕若 T 的维数为 n，则 P 是一 n 阶方阵. 根据么正表示定理，T 可取作么正矩阵，从而 $T(A_1)$，$T(A_2)$等每个矩阵都具有 n 个本征矢的完备集. 又由于 P 与 $T(A_i)$等等对易，从而 P 也有 n 个线性无关的本征矢. 设 u_j 是 P 的具有本征值 c_j 的本征矢，即

$$Pu_j = c_j u_j \tag{2}$$

以 $T(A_i)$左乘上式两边得

$$T(A_i)Pu_j = c_j T(A_i)u_j$$

由(1)式及上式得

$$PT(A_i)u_j = c_j T(A_i)u_j \tag{3}$$

上式表明，对所有 $A_i \in G$，$T(A_i)u_j$ 也是 P 的具有同一本征值 c_j 的本征矢. 设 P 有 m 个这样的独立的本征矢对应于同一本征值 c_j. 但属于一个本征值的本征矢生成一个在 G 下的不变子空间. 若 L_m 是 L_n 的真子空间，则表示 T 必是可约的，但这与 T 是不可约表示的假设矛盾，因此 L_m 必与 L_n 重合，并且 P 的全部本征值相等，譬如说 $c_j \equiv c$，于是给出 $P = cE$，从而证明了定理.

这个定理的重要性在于它的逆定理亦成立这一事实. 因此，若我们能够证明与某一表示 T 的所有矩阵都对易的任一矩阵 P 必为常数矩阵的话，则此表示是不可约的. 显然，由此推知，若 P 不是常数矩阵，则表示必是可约的. 这样，舒尔引理可作为判断表示是否可约的一个判据.

2. 舒尔引理2

假设 $T^{(i)}$和 $T^{(j)}$是群 G 分别在两个空间 L_i 和 L_j 中的两个不可约表示，维数分别为 l_i 和 l_j. 若 l_i 行 l_j 列的矩阵 M 满足下述关系式

$$T^{(i)}(A_k)M = MT^{(j)}(A_k), \quad \text{对所有 } A_k \in G \tag{4}$$

则或者(a)$M=0$，或者(b)$\det M \neq 0$，此时 $T^{(i)}$与 $T^{(j)}$是等价表示.

顺便指出，两个表示只有维数相同时才能等价，因此若 $l_j \neq l_i$，则只能(a)成立.

〔证明〕注意到$(AB)^+ = B^+A^+$，则由(4)式可得

$$M^+ T^{(i)+}(A_k) = T^{(j)+}(A_k)M^+, \quad \text{对所有 } A_k \in G$$

注意到$T(A^{-1})=[T(A)]^{-1}$及T是幺正表示$T^{(i)+}(A)=T^{(i)-1}(A)$，则上式变成

$$M^+ T^{(i)}(A_k) = T^{(j)}(A_k^{-1})M^+, \quad \text{对所有 } A_k \in G.$$

以M右乘上式，得到

$$M^+ T^{(i)}(A_k^{-1})M = T^{(j)}(A_k^{-1})M^+ M$$

将(4)式代入上式得

$$M^+ MT^{(j)}(A_k^{-1}) = T^{(j)}(A_k^{-1})M^+ M, \quad \text{对所有 } A_k \in G \tag{5}$$

上式表明矩阵M^+M与所有的$T^{(j)}(A_k^{-1})(A_k\in G)$对易，根据舒尔引理1，它应为一常数矩阵：

$$M^+ M = cE \tag{6}$$

首先考虑$l_i=l_j$的情形．不妨设$l_i=l_j=n$．由(6)式可得

$$\det(M^+ M) = \det M^+ \det M = c^n \tag{7}$$

若$c\neq 0$，则$\det M\neq 0$（因为$\det M^+=(\det M)^*$），故M^{-1}存在，由(4)式可得

$$T^{(j)}(A_k) = M^{-1}T^{(i)}(A_k)M, \quad \text{对所有 } A_k \in G \tag{8}$$

上式表明，$T^{(i)}$和$T^{(j)}$是等价表示．若$c=0$，则$M^+M=0$．取(6)式的第i行j列元素，得到

$$\sum_k M_{ik}^+ M_{ki} = 0$$

亦即

$$\sum_k M_{ki}^* M_{ki} = \sum_k |M_{ki}|^2 = 0$$

上式当且仅当$M_{ki}=0(1\leqslant k\leqslant n)$时成立．但$i$是任意的，可取由1到$n$的任一值，故$M=0$．

现在讨论$l_i\neq l_j$的情形，不失一般性，我们可以假设$l_i<l_j$．我们添上(l_j-l_i)行零，使M变成一新（方）矩阵M'：

$$M' = \overbrace{\begin{bmatrix} M \\ \cdots \\ 0 \end{bmatrix}}^{l_j} \begin{matrix} \}\ l_i \\ \\ \}\ l_j-l_i \end{matrix} \tag{9}$$

其厄密共轭矩阵M'^+为

$$M'^{+} = [\overbrace{M^{+}}^{l_i} \quad \vdots \overbrace{\quad 0}^{l_j-l_i}]\} l_j \tag{10}$$

于是,由矩阵乘法很容易看出

$$M'^{+}M' = M^{+}M$$

故 $$\det(M'^{+}M') = \det(M^{+}M)$$

亦即 $$\det(M'^{+})\det(M') = c^n$$

其中用了(7)式,并假定 $l_j=n$. 然而观察(9)式和(10)式可知,

$$\det(M') = \det(M'^{+}) = 0$$

从而得到 $c=0, M^{+}M=0$. 再一次取 $M^{+}M$ 的第 i 行 j 列元素,同样可证 $M=0$. 于是定理证毕.

3. 阿贝尔群的不可约表示是一维表示

作为舒尔引理的应用例子,我们可以证明,阿贝尔群的不可约表示必是一维表示. 设 $T^{(i)}$是阿贝尔群的一个不可约表示. 由于阿贝尔群元素彼此对易,例如 $A_kA_l=A_lA_k$,于是有

$$T^{(i)}(A_k)T^{(i)}(A_l) = T^{(i)}(A_l)T^{(i)}(A_k)$$

对所有群元素,上式均成立. 根据舒尔引理1,$T^{(i)}(A_k)$必为常数乘以单位矩阵,即

$$T^{(i)}(A_k) = c_{A_k}^{(i)}E, \quad 对所有 A_k \in G$$

这样,表示矩阵 $T^{(i)}(A_k)$是对角化的(对所有 $A_k\in G$),因而表示 $T^{(i)}$是可约的. 但此结论与不可约表示的假设矛盾,除非它是一维的,于是定理得证.

§6 正交性定理

1. 正交性关系

现在我们利用舒尔引理推导矩阵表示的正交性关系(orthogonality relations). 考虑 g 阶群 G 的两个不可约表示 $T^{(i)}$和 $T^{(j)}$,表示的维数分别为 l_i 和 l_j. 首先构造如下的矩阵 M:

$$M = \frac{1}{g}\sum_{A\in G}T^{(i)}(A)XT^{(j)}(A^{-1}) \tag{1}$$

式中 X 是任一与群元素无关的($l_i\times l_j$)矩阵. 以 $T^{(i)}(B)$($B\in G$)左乘

上式两边，得

$$
\begin{aligned}
T^{(i)}(B)M &= \frac{1}{g}\sum_{A\in G} T^{(i)}(B)T^{(i)}(A)XT^{(j)}(A^{-1}) \\
&= \frac{1}{g}\sum_{A\in G} T^{(i)}(BA)XT^{(j)}(A^{-1})T^{(j)}(B^{-1})T^{(j)}(B) \\
&= \frac{1}{g}\sum_{A\in G} T^{(i)}(BA)XT^{(j)}((BA)^{-1})T^{(j)}(B) \\
&= \frac{1}{g}\sum_{A\in G} T^{(i)}(C)XT^{(j)}(C^{-1})T^{(j)}(B) \\
&= MT^{(j)}(B)
\end{aligned}
$$

其中利用了 $BA=C$. 上式对所有 $B\in G$ 成立.

下面分两种情况：

(1)若 $T^{(i)}$ 和 $T^{(j)}$ 是相同的表示，此时 M 与 $T^{(i)}(B)$ 对易，则根据舒尔引理1，$M=cE$；

(2)若 $T^{(i)}$ 和 $T^{(j)}$ 是不等价的，则根据舒尔引理2，$M=0$.

我们把这两种情况结合为一个方程：

$$M = c\delta_{ij}E \tag{2}$$

或

$$M_{ks} = c\delta_{ij}\delta_{ks} \tag{3}$$

其中 δ_{ij} 理解为当不可约表示 $T^{(i)}$ 和 $T^{(j)}$ 是不等价时 $\delta_{ij}=0$，而当 $T^{(i)}$ 和 $T^{(j)}$ 是相同的表示时 $\delta_{ij}=1$.

取(1)式的 k 行 s 列矩阵元并注意到(3)式，我们得

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{g}\sum_{A\in G}\sum_{p,q} T^{(i)}_{kp}(A)X_{pq}T^{(j)}_{qs}(A^{-1}) &= M_{ks} \\
&= c\delta_{ij}\delta_{ks}
\end{aligned} \tag{4}
$$

式中 X 是任意的，而 c 将与 X 的选择有关. 我们利用 X 的任意性选取 $X_{pq}=\delta_{pm}\delta_{qn}$，即 X 选为除 m 行 n 列元素为1外，其余元素全为零的矩阵. 于是，(4)式变为

$$\frac{1}{g}\sum_{A\in G} T^{(i)}_{km}(A)T^{(j)}_{ns}(A^{-1}) = c\delta_{ij}\delta_{ks} \tag{5}$$

为求出 c，令 $i=j$，$k=s$，并将上式两边对 k 求和，得到

$$\frac{1}{g}\sum_{k=1}^{l_i}\sum_{A\in G}T_{km}^{(i)}(A)T_{nk}^{(i)}(A^{-1}) = c\sum_{k=1}^{l_i}\delta_{kk} = cl_i$$

即
$$\frac{1}{g}\sum_{A\in G}T_{mn}^{(i)}(E) = cl_i$$

或
$$\frac{1}{g}\cdot g\delta_{mn} = cl_i$$

从而得到
$$c = \frac{\delta_{mn}}{l_i} \tag{6}$$

将 c 值代入(5)式，我们得到

$$\sum_{A\in G}T_{km}^{(i)}(A)T_{ns}^{(j)}(A^{-1}) = \frac{g}{l_i}\delta_{ij}\delta_{ks}\delta_{mn} \tag{7}$$

因为任何表示等价于幺正表示，上式可以进一步简化. 注意到

$$T^{(j)}(A^{-1}) = (T^{(j)}(A))^{-1};$$

以及 $T^{(j)}$的幺正性 $T^{(j)+}(A)=T^{(j)-1}(A)$，便有

$$T_{ns}^{(j)}(A^{-1}) = T_{ns}^{(j)-1}(A) = T_{ns}^{(j)+}(A) = T_{sn}^{(j)*}(A)$$

将上式代入(7)式，最后得到

$$\sum_{A\in G}T_{km}^{(i)}(A)T_{sn}^{(j)*}(A) = \frac{g}{l_i}\delta_{ij}\delta_{ks}\delta_{mn} \tag{8}$$

上式通常称为群的不可约表示的大正交性定理(great orthogonality theorem)，它在群表示理论中占据着中心地位.

正交性关系(8)式表明，求和仅遍及群元素而矩阵元的四个下标是相当任意的. 当 $T^{(i)}$和 $T^{(j)}$是不等价不可约表示时，总和为零；甚至当 $T^{(i)}$和 $T^{(j)}$是相同的表示时，只要 $k\neq s, m\neq n$，总和仍为零. 剩下非零的情况可表示为

$$\sum_{A\in G}|T_{km}^{(i)}(A)|^2 = \frac{g}{l_i} \tag{9}$$

其中 k, m 是任意的.

〔例〕群 D_3不可约表示的正交性.

由§4(6)式可知，群 D_3有一个一维表示 $T^{(2)}$和一个二维不可约表示 $T^{(3)}$. 此外，每一个群都有一个恒等表示 $T^{(1)}$. 群 D_3的这三个不可约表示列于表3中(见第91页).

这三个不可约表示的维数分别为 $l_1=1, l_2=1, l_3=2$，而 $g=6$.

表 3

表示 \ 群元素	E	R_a	R_b	R_c	R_1	R_2
$T^{(1)}$	1	1	1	1	1	1
$T^{(2)}$	1	-1	-1	-1	1	1
$T^{(3)}$	$\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}-1 & 0\\0 & 1\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\\-\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2}\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2}\\\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2}\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}-\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\\\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2}\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}-\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2}\\-\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2}\end{bmatrix}$

下面我们验证正交性关系

$$\sum_{A\in G} T^{(1)}(A)T^{(2)}(A) = 0$$

$$\sum_{A\in G} T^{(3)}_{km}(A)T^{(2)}(A) = 0, \quad \text{对任何 } k \text{ 和 } m$$

$$\sum_{A\in G} [T^{(2)}(A)]^2 = 6/1 = 6$$

$$\sum_{A\in G} [T^{(3)}_{km}(A)]^2 = 6/2 = 3, \quad \text{对任何 } k \text{ 和 } m$$

等等.

2. 正交性定理的解释

我们用线性空间的语言给(8)式作一些解释. 令 g 阶有限群 $G=\{E,A,B,C,\cdots\}$的不同的不可约表示的总数为 C. 让我们把 $T^{(i)}_{km}$看成群 G 的元素的函数,这个函数定义在 g 个分立"点"E,A,B,等等之上. 若对变量 A 画出函数 $T^{(i)}_{km}$,那末它看上去将如图3-2所示.

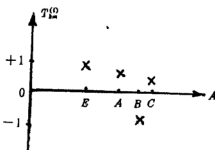


图 3-2

对每一个 i,k,m 值,我们有一个这样的函数. 所有这些函数确定一个 g 维函数空间(矢量空间),因为此空间中的函数可由它的 g 个"分量"完全划定,而 g 就是群元素的个数即群的阶. 这个空间通常称作群空间(group space),群空间的维数等于群的阶数.

我们把函数 $T^{(i)}_{km}$ 称为群空间中的表示矢量(representation vectors),其分量为 $T^{(i)}_{km}(A)$, $T^{(i)}_{km}(B)$, $\cdots$. (9)式表示矢量 $T^{(i)}_{km}$长度的平方为$\frac{g}{l_i}$. 正交性关系(8)式则可表为两个矢量 $T^{(j)}_{sn}$和 $T^{(i)}_{km}$标积的形式:

$$(T^{(j)}_{sn}, T^{(i)}_{km}) = \sum_{A\in G} T^{(j)*}_{sn}(A)T^{(i)}_{km}(A)$$

$$=\frac{g}{l_i}\delta_{ij}\delta_{ks}\delta_{mn} \tag{10}$$

这就意味着两表示矢量$T_{km}^{(i)}$与$T_{km}^{(j)}$之间互相正交.

表示矢量$T_{km}^{(i)}$共有多少个?注意到$1\leqslant i\leqslant C$, $1\leqslant k, m\leqslant l_i$,对于每个$i$值,有$l_i^2$个这样的矢量,因而矢量的总数为$\sum_{i=1}^{C}l_i^2$.这些矢量是否张成全空间,即它们是否彼此线性无关,现在还不知道.尽管这样,由于矢量空间中独立矢量的个数不得超过空间的维数,我们仍有下面的关系:

$$\sum_{i=1}^{C}l_i^2\leqslant g \tag{11}$$

这个条件是对g阶群不可约表示数目的一个限制.稍后我们将证明,(11)式中等号成立.

§7 群表示的特征标

现在我们来介绍另一个重要概念——表示的特征标.

我们已经看到,任一给定矢量空间,群表示的矩阵不是唯一的,因为它们依赖于基矢的选择,甚至依赖基矢的编序.然而,因为它们都是定义在同一矢量空间上的,所有这些表示必由相似变换联系着,因而必然相互等价.我们知道,矩阵的迹在相似变换下不变,因而我们看到,表示的所有矩阵的迹(即矩阵的全部本征值之和)将成为表示的唯一特征(不管基矢如何选择).

设T是群G的一个(可约或不可约)表示,我们把表示T的矩阵$T(A)$的迹称为表示T中群元素A的特征标,记为$\chi(A)$,即

$$\chi(A)=\mathrm{Tr}T(A)=\sum_k T_{kk}(A) \tag{1}$$

对群的每一个元素上式均成立.$\chi(A)$,$\chi(B)$,…的集合则定义为表示T的特征标(character)χ.显然,若表示是一维的,则特征标就是表示自身.

可以证明,同一表示中共轭元素的特征标相同,这是因为矩阵

的迹在相似变换下不变.事实上,若 A 和 B 是共轭元素,则存在 C,使得

$$A = C^{-1}BC \tag{2}$$

因而有

$$T(A) = T(C^{-1})T(B)T(C) \tag{3}$$

两边取迹得

$$\begin{aligned}\chi(A) &= \mathrm{Tr}T(A) \\ &= \mathrm{Tr}[T(C^{-1})T(B)T(C)] \\ &= \mathrm{Tr}[T(C)T(C^{-1})T(B)] \\ &= \mathrm{Tr}[T(CC^{-1})T(B)] \\ &= \mathrm{Tr}[T(E)T(B)] \\ &= \chi(B)\end{aligned} \tag{4}$$

其中利用了迹的循环性 $\mathrm{Tr}(ABC)=\mathrm{Tr}(CAB)=\mathrm{Tr}(BCA)$.于是,我们得出结论,同一类中的所有元素(它们互相共轭),在同一表示中具有相同的特征标.因此,特征标是类的函数,正如表示是群元素的函数一样.

§8 特征标的正交性关系

1.行的正交性关系

我们可以利用不可约表示的正交性关系§6(8)式来推导不可约表示的特征标的正交性关系.在§6(8)式中令 $k=m,s=n$,并对 k,s 求和,得到

$$\begin{aligned}\sum_{A\in G}\sum_k T^{(i)}_{kk}(A)\sum_s T^{(j)*}_{ss}(A) &= \frac{g}{l_i}\sum_{k,s}\delta_{ks}\delta_{ks}\delta_{ij} \\ &= \frac{g}{l_i}l_i\delta_{ij} = g\delta_{ij}\end{aligned}$$

根据特征标的定义式§7(1),上式变成

$$\sum_{A\in G}\chi^{(i)}(A)\chi^{(j)*}(A) = g\delta_{ij} \tag{1}$$

式中 $\chi^{(i)}(A)$是在表示 $T^{(i)}$中元素 A 的特征标,等等.若群的类 C_k 中元素的个数是 n_k,则

$$\sum_k \sqrt{\frac{n_k}{g}}\chi_k^{(i)} \sqrt{\frac{n_k}{g}}\chi_k^{(j)*} = \delta_{ij} \tag{2}$$

式中 $\chi_k^{(i)}$ 是表示 $T^{(i)}$ 中类 C_k 的任一元素的特征标，等等，求和遍及群 G 的不同类，$k=1,2,\cdots,n$，n 为类的个数.

在 $i=j$ 的特殊情形下，(1)和(2)式分别变成

$$\sum_{A\in G} |\chi^{(i)}(A)|^2 = g \tag{3}$$

$$\sum_k n_k |\chi_k^{(i)}|^2 = g \tag{4}$$

(1)式或(2)式就是群的不可约表示的特征标的正交关系. 我们把(2)式中的 $\sqrt{\frac{n_k}{g}}\chi_k^{(i)}$ 看作是矢量 $\chi^{(i)}$ 的分量，这样的分量有 n 个($k=1,2,\cdots,n$). 对于群的每一个不可约表示，我们有一个这样的矢量. 这些矢量 $\chi^{(i)},\chi^{(j)},\cdots$ 构成一个 n 维空间，这是因为其中每一个矢量 $\chi^{(i)}$ 都由 n 个分量划定，而 n 就是群 G 中类的个数. 这个空间称为类空间(class space)，类空间的维数等于群中类的个数.

我们称矢量 $\chi^{(i)}$ 为类空间中的特征标矢量，其分量为 $\sqrt{\frac{n_k}{g}}\chi_k^{(i)}$，并可将(2)式表为两个矢量 $\chi^{(j)}$ 和 $\chi^{(i)}$ 标积的形式：

$$(\chi^{(j)},\chi^{(i)}) = \sum_{k=1}^{n} \sqrt{\frac{n_k}{g}}\chi_k^{(j)*} \sqrt{\frac{n_k}{g}}\chi_k^{(i)} = \delta_{ij} \tag{5}$$

这就表示两特征标矢量 $\chi^{(j)}$ 与 $\chi^{(i)}$ 之间互相正交.

特征标矢量有多少个？因为对于每一个不可约表示都有一个这样的矢量，即特征标矢量的个数等于不可约表示的个数. 设不可约表示的个数为 C，则特征标矢量就有 C 个. 它们是否张成全空间，即它们是否彼此线性无关，现在还不知道. 但是，矢量空间中独立矢量的个数不得超过空间的维数，因此我们可得到

$$C \leqslant n \tag{6}$$

即群 G 的不可约表示个数不大于类的个数. 事实上，以后将证明上式中等号成立.

用所谓特征标表来表示群的每一类和每一个不等价不可约表

示的特征标是方便的.表的列用类标记,行用不等价不可约表示标记.群的类数等于不等价不可约表示的个数意味着特征标表是方形的.例如群 D_3的不可约不等价表示的特征标表构造如下(表4).

表4 群 D_3的特征标表

表示 \ 类	$\mathscr{C}(E)$	$\mathscr{C}(R_a,R_b,R_c)$	$\mathscr{C}(R_1,R_2)$
$T^{(1)}$	1	1	1
$T^{(2)}$	1	-1	1
$T^{(3)}$	2	0	-1

下面验证正交性关系.例如

$$\sum_k \sqrt{\frac{n_k}{g}}\chi_k^{(1)} \sqrt{\frac{n_k}{g}}\chi_k^{(2)*}$$

$$=\sqrt{\frac{1}{6}}\times 1\times \sqrt{\frac{1}{6}}\times 1+\sqrt{\frac{3}{6}}\times 1\times \sqrt{\frac{3}{6}}\times(-1)$$

$$+\sqrt{\frac{2}{6}}\times 1\times \sqrt{\frac{2}{6}}\times 1=0$$

$$\sum_k \sqrt{\frac{n_k}{g}}\chi_k^{(2)} \sqrt{\frac{n_k}{g}}\chi_k^{(3)*}$$

$$=\sqrt{\frac{1}{6}}\times 1\times \sqrt{\frac{1}{6}}\times 2+\sqrt{\frac{3}{6}}\times(-1)\times \sqrt{\frac{3}{6}}\times 0$$

$$+\sqrt{\frac{2}{6}}\times 1\times \sqrt{\frac{2}{6}}\times(-1)=0$$

$$\sum_k n_k|\chi_k^{(3)}|^2=1\times 2^2+3\times 0^2+2\times(-1)^2=6=g$$

$$\sum_k n_k|\chi_k^{(2)}|^2=1\times 1^2+3\times(-1)^2+2\times 1^2=6=g$$

2.列的正交性关系

在(6)式中取等号,即群的不等价不可约表示的个数等于该群的类数,我们便可将正交性关系(2)式表为另一形式.为此,定义 n

$\times n$ 矩阵 B,其矩阵元为

$$B_{ik} = \sqrt{\frac{n_k}{g}}\chi_k^{(i)}$$

这里 n 是类的个数,即不等价不可约表示的个数. 由正交性关系(2)式可得

$$\sum_k B_{ik}B_{jk}^* = \delta_{ij}, \quad \text{对任意 } i \text{ 和 } j$$

即

$$\sum_k B_{ik}B_{kj}^+ = \delta_{ij}, \quad \text{对任意 } i \text{ 和 } j$$

用矩阵形式可表为

$$BB^+ = E$$

因为 B 是方矩阵,这就意味着 B 的行列式的模为1,从而 B 有逆 $B^{-1}=B^+$,进而也有

$$B^+ B = E$$

表为矩阵元的关系为

$$\sum_i B_{ki}^+ B_{il} = \delta_{kl}$$

即

$$\sum_i B_{ik}^* B_{il} = \delta_{kl}$$

注意到 $B_{ik} = \sum_k \chi_k^{(i)}$,则由上式可得

$$\sum_{i=1}^{c} \sqrt{\frac{n_k}{g}}\chi_k^{(i)*} \sqrt{\frac{n_k}{g}}\chi_l^{(i)} = \delta_{kl} \tag{7}$$

其中求和遍及群 G 的所有不可约表示. 上式就是特征标正交性关系的另一种表达形式,代表特征标对不同类的正交性,即意味着特征标表的任意两列正交,称为列的正交性关系. 而特征标的正交性关系(2)式则称为行的正交性关系,意味着特征标表的任意两行正交.

特征标列的正交性关系(7)式虽然并不包含任何新的信息,但对凭观察写下群表示的特征标是有帮助的,参阅 § 12.

§9 可约表示的约化

群 G 的表示 T，一般说来是可约的，这样一个可约表示，可以约化为它的不可约表示的组分(constituents)之和，即可以写成 §4 (5)式那样的不可约表示的线性组合：

$$T = a_1T^{(1)} \oplus a_2T^{(2)} \oplus \cdots = \sum_i a_iT^{(i)} \tag{1}$$

利用表示的特征标，我们可以求出在 T 的约化中不可约表示 $T^{(i)}$ 出现的次数 a_i. 为此，我们取(1)式两边的迹. 若 $\chi(A)$ 等等代表表示 T 中诸元素的特征标，则对所有 $A\in G$，我们有

$$\chi(A) = \sum_i a_i\chi^{(i)}(A) \tag{2}$$

或

$$\chi_k = \sum_i a_i\chi_k^{(i)} \tag{3}$$

以 $\chi^{(j)*}(A)$ 乘(2)式两边并对群的所有元素 A 求和，注意到 §8(1)式便得到

$$\sum_{A\in G}\chi^{(j)*}(A)\chi(A) = \sum_i a_i\sum_{A\in G}\chi^{(j)*}(A)\chi(A)\chi^{(j)}(A)\chi(A)$$

$$= \sum_i a_ig\delta_{ij} = a_jg$$

由此得

$$a_i = \frac{1}{g}\sum_{A\in G}\chi^{(i)*}(A)\chi(A) \tag{4}$$

类似地，由(3)式并利用 §8(2)式，则可求得

$$a_i = \frac{1}{g}\sum_k n_k\chi_k^{(i)*}\chi_k \tag{5}$$

(4)式求和遍及群元素，(5)式求和遍及群的不同类. (4)式或(5)给我们提供了一个求(1)式中系数的方法，即求不可约表示 $T^{(i)}$ 出现次数的方法.

不可约表示的特征标 $\chi^{(i)}(A)$ 或 $\chi_k^{(i)}$ 称为原始特征标(primitive characters)或单纯特征标(simple characters)，而可约表示的特征标

$\chi(A)$或χ_k称为复合特征标(compound characters). 群的复合特征标可以象(2)或(3)式那样表示为单纯特征标的线性组合.

〔例〕 群D_3的三维表示的约化.

由群D_3的三维表示§1(13)式可看出,三个类的特征标分别为$\chi_1=3,\chi_2=-1,\chi_3=0$,记为$\chi=(3,-1,0)$,三个不可约表示的特征标见表4.

我们写下

$$T=a_1T^{(1)}\oplus a_2T^{(2)}\oplus a_3T^{(3)}$$

利用(5)式(注意$n_1=1,n_2=3,n_3=2,g=6$). 我们有

$$a_1=\frac{1}{6}\{1\times1\times3+3\times1\times(-1)+2\times1\times0\}=0$$

$$a_2=\frac{1}{6}\{1\times1\times3+3\times(-1)\times(-1)+2\times1\times0\}=1$$

$$a_3=\frac{1}{6}\{1\times2\times3+3\times0\times(-1)+2\times(-1)\times0\}=1$$

故
$$T=T^{(2)}\oplus T^{(3)}$$

即群D_3的三维表示约化为一个一维表$T^{(2)}$和一个二维表示$T^{(3)}$的直和(参阅§4(6)式).

§10 不可约性的一个判据

从一个表示的特征标我们立刻可以推出表示是否可约.

根据§8(3)或(4)式可知,如果表示$T^{(i)}$是不可约的,则有

$$\sum_{A\in G}|\chi^{(i)}(A)|^2=g \tag{1}$$

$$\sum_k n_k|\chi_k^{(i)}|^2=g \tag{2}$$

显然,对某一表示T,如果它是不可约表示,也应有

$$\sum_{A\in G}|\chi(A)|^2=g \tag{3}$$

$$\sum_k n_k|\chi_k|^2=g \tag{4}$$

式中χ_k是群的第k类特征标. 反之,如果满足(3)或(4)式,则表示

T 必是不可约的，证明如下. 用 $\chi^*(A)$乘 § 9(2)式两边，并对群的所有元素求和，再除以群 G 的阶 g，并注意到 § 8(1)式，我们得

$$\frac{1}{g}\sum_{A\in G}\chi^*(A)\chi(A) = \frac{1}{g}\sum_{i,j}a_i^* a_j\sum_{A\in G}\chi^{(i)*}(A)\chi^{(j)}(A)$$
$$= \sum_{i,j}a_i^* a_j\delta_{ij}$$
$$= \sum_i |a_i|^2 \tag{5}$$

如果让上式满足(3)式，则上式右边等于1，由于诸 a_i 是非负整数，于是除一个系数，例如 $a_k=1$外，所有其它系数皆为零. 由此得到当满足(3)式时 $T=T^{(k)}$，即 T 是不可约表示.

类似地可证明满足(4)式时 T 是不可约表示.

于是，我们得到一个非常简单的关于表示的不可约性的判据：一个表示是不可约表示的充要条件是其特征标满足(3)式或(4)式.

例如群 D_3的二维表示 $T^{(3)}$是不可约的，因为从表4可得出

$$\sum_k n_k|\chi_k|^2 = 4 + 0 + 2 = 6 = g$$

§ 11　正 规 表 示

1. 正规表示

前面我们证明过，群的所有不等价不可约表示的维数的平方和不超过群的阶数(群元素数目)，即 § 6(11)式. 我们也证明过，群的不等价不可约表示的个数不超过群的类数，即 § 8(6)式. 但是从群 D_3我们看到，它有三个不等价不可约表示 $T^{(1)}$、$T^{(2)}$和 $T^{(3)}$，而它正好有三个类 $\mathscr{C}_1$、$\mathscr{C}_2$、$\mathscr{C}_3$. 一般地，我们将证明，§ 6(11)式和 § 8(6)式中等号成立. 在证明过程中，我们借助于人为的设计，构造一个非常特殊的表示，它的维数等于 g，即群元素数目. 这种特殊的表示被称为“正规表示”(regular representation).

让我们按如下方式对群 C_{4v}的每一元素构造 g 维方阵. 在对角

线上全为 E 的乘法表(第一章表4)中,若某元素出现的位置换成1,而其他位置换成0,就得到该元素对应的矩阵. 例如,$T^{(R)}(E)$就是一个8维单位方阵,其他矩阵,譬如说 $T^{(R)}(C_4)$,将取如下形式:

$$T^{(R)}(C_4)=\begin{bmatrix}0&1&0&0&0&0&0&0\\0&0&1&0&0&0&0&0\\0&0&0&1&0&0&0&0\\1&0&0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&1\\0&0&0&0&0&0&1&0\\0&0&0&0&1&0&0&0\\0&0&0&0&0&1&0&0\end{bmatrix} \tag{1}$$

注意,每行或每列都包含1,而且仅包含一次,正如重排列定理所要求的那样.

为证明这种矩阵确实总能生成一个表示,我们不用指标 i,j 等而用群元素本身给行列编号,也就是我们可以把群 G 的 g 个元素看作 g 维空间中的坐标轴. 因为用一个元素乘只不过给出所有元素的一个重排列,故可以把群元素的作用看成群空间中使每一坐标轴转变到另一坐标轴方向的旋转. 于是在此表示中 A 的矩阵的 B 行 C 列元素为

$$T_{BC}^{(R)}(A)=\delta_{BA,C}=\begin{Bmatrix}1, & \text{当 } BA=C\\0, & \text{当 } BA\neq C\end{Bmatrix} \tag{2}$$

令 D,F 和 H 是 G 的一些元素,而且

$$AD=F \tag{3}$$

试考察

$$\begin{aligned}(T^{(R)}(A)T^{(R)}(D))_{BC}&=\sum_{H\in G}T_{BH}^{(R)}(A)T_{HC}(D)\\&=\sum_{H\in G}\delta_{BA,H}\delta_{HD,C}\\&=\delta_{BAD,C}\\&=\delta_{BF,C}\\&=T_{BC}^{(R)}(F)\end{aligned} \tag{4}$$

由上式得

$$T^{(R)}(A)T^{(R)}(D) = T^{(R)}(F) \tag{5}$$

比较(3)式和(5)式可知,诸矩阵 $T^{(R)}(A)$,$T^{(R)}(B)$,$T^{(R)}(F)$,…的集合确实是群 G 的一个表示,称为正规表示.

2. 正规表示的特征标

根据正规表示的性质(2)式,可求得正规表示的特征标.显然,除恒等元的特征标为 g 外,其余元素的特征标为零,即

$$\left.\begin{aligned} &\chi(R)(A) = 0, \quad \text{当 } A \neq E \text{ 时} \\ &\chi(R)(E) = g. \end{aligned}\right\} \tag{6}$$

3. 正规表示的约化

现在我们来研究正规表示的约化.设

$$T^{(R)} = \sum_i a_i T^{(i)} \tag{7}$$

由§9(4)式我们有

$$a_i = \frac{1}{g}\sum_{A\in G}\chi^{(i)*}(A)\chi^{(R)}(A)$$

式中 $\chi^{(R)}$是正规表示的特征标.注意到(5)式及恒等元的特征标等于表示的维数,上式变成

$$a_i = \frac{1}{g}\chi^{(i)*}(E)\cdot g = \chi^{(i)*}(E) = l_i \tag{8}$$

式中 l_i 是不可约表示 $T^{(i)}$的维数.上式表明,群的每一个不可约表示在正规表示约化中出现的次数 a_i 等于其维数 l_i.

4. 两个等式的证明

我们利用正规表示的性质,证明§6(11)式和§8(6)式中的等号成立.为此将(8)式代入(7)式得

$$T^{(R)} = \sum_i l_i T^{(i)} \tag{9}$$

对上式两边取元素 E 的迹,得

$$\chi^{(R)}(E) = \sum_i l_i \chi^{(i)}(E)$$

注意到 $\chi^{(R)}(E)=g$,$\chi^{(i)}(E)=l_i$,由上式得到

$$g = \sum_{i=1}^{c} l_i^2 \tag{10}$$

这就证明了§6(11)式中等号成立，即群的所有可能的不等价不可约表示的维数平方和等于群的阶(群元素数). 这样一来，诸表示矢量 $T_{km}^{(i)}$不仅具有正交性(见§6(8)式)，而且它们构成群空间中的正交矢量的完备集. 即是说，再也没有别的独立的表示矢量与所有不可约表示的表示矢量正交了. 这又蕴含着，再没有别的特征标矢量与所有不可约表示的特征标矢量正交了. 因而，所有不可约表示的特征标矢量一定是类空间上正交矢量的完备集. 于是，不可约表示的个数必等于类空间的维数，即群中类的个数. 这一简单的讨论证明了§8(6)式中等号成立. 这样，我们就证明了，群的不等价不可约表示的个数等于群中类的个数，即

$$C = n \tag{11}$$

§12 特征标表的构造

我们知道，群 D_3特征标表是从表示矩阵的对角元素求和得到的. 在许多情形下，可以不必知道表示矩阵而直接求出群的不可约表示的特征标. 事实上，各种群的特征标表早已为人们计算过，有现成的表可查. 我们这里只想介绍如何利用特征标的性质来推出特征标表.

综合以上的讨论，可归纳出以下几个性质：

(1)不可约表示的数目等于类的数目

$$C = n \tag{1}$$

(2)不可约表示的维数 l_i 的平方和等于群的阶 g

$$\sum_{i=1}^{c} l_i^2 = g \tag{2}$$

在许多情形下，由上式可得到 l_i 的唯一的整数解. 因为恒等元 E 的特征标等于表示的维数

$$\chi^{(i)}(E) = l_i \tag{3}$$

因此，特征标表的第一列恰好就是整数 l_i.

(3)对每一个群，总有一个恒等表示，它是一维的，因而 $T(A)=1,\chi(A)=1$，对所有 $A\in G$. 由它们可确定表的一行，通常取为第一行.

(4)行特征标的正交性关系

$$\sum_{k=1}^{n}\sqrt{\frac{n_k}{g}}\chi_k^{(i)}\sqrt{\frac{n_k}{g}}\chi_k^{(j)*}=\delta_{ij} \tag{4}$$

特别是选取 $T^{(j)}$ 为恒等表示时，$\chi_k^{(j)}=1$，于是对 $T^{(i)}$ 不是恒等表示，即除第一行外的其他行有

$$\sum_k n_k\chi_k^{(i)}=0,\quad (i=2,3,\cdots c) \tag{5}$$

(5)列特征标的正交性关系

$$\sum_{i=1}^{c}\chi_k^{(i)*}\chi_l^{(i)}=\frac{n_k}{g}\delta_{kl} \tag{6}$$

特别是选取 C_k 为类 E 时，$\chi_k^{(i)}=l_i$，于是，对除第一列外的其他列有

$$\sum_{i=1}^{c}l_i\chi_l^{(i)}=0,\quad (l=2,3,\cdots,n) \tag{7}$$

利用上述性质可能构造较小的群的特征标表，只要知道群的如下信息：群的阶 g，类的数目 n 和每类中元素的个数 n_k. 对较大的群，这种方法不能提供足够的信息来推得特征标表. 我们再次指出，应用群论于物理问题时，在许多场合下只须查特征标表.

〔例〕群 C_{4v} 的特征标表

因为群 C_{4v} 有五个类，故必有五个不可约表示，记为 $T^{(1)},T^{(2)},T^{(3)},T^{(4)}$ 和 $T^{(5)}$，它们的维数分别记为 l_1,l_2,l_3,l_4，和 l_5，必须满足

$$l_1^2+l_2^2+l_3^2+l_4^2+l_5^2=g=8$$

l_i 是整数的唯一可能解是四个 l_i 等于1而另一个等于2. l_i 的顺序是无关紧要的. 为了方便，令 $l_1=l_2=l_3=l_4=1,l_5=2$. 因为恒等元的特征标等于不可约表示的维数，故容易得出特征标表的第一列为 1,1,1,1,2.

表的第一行也容易写出，只要把每一类的特征标记为1，因为它对应于恒等表示. 由于一维表示就是它的特征标，故对表示 $T^{(1)}$

到 $T^{(4)}$，特征标自身要满足乘法表. 于是，平方等于 E 的元素（例如 C_4^2, m_x, σ_μ 等），其特征标只能是±1. 由于同类元素具有相同的特征标，故 m_x 和 m_y 或 σ_μ 和 σ_ν 的特征标都由1表示或都由－1表示. 群 C_{4v}的乘法表（第一章表4）表明，$m_x m_y = C_4^2$（或 $\sigma_\mu \sigma_\nu = C_4^2$），在所有一维表示中 $\chi(C_4^2)$必等于＋1. 由此可得出 $T^{(2)}$、$T^{(3)}$和 $T^{(4)}$中的 C_4^2的特征标值.

对 C_4和 C_4^3这两个元素，因为 $(C_4)^2 = (C_4^3)^2 = C_4^2$，且已知 $\chi(C_4^2) = +1$，故 $\chi(C_4)$和 $\chi(C_4^3)$对 $T^{(2)}$、$T^{(3)}$和 $T^{(4)}$只能等于±1. 现在利用正交性关系，每一行特征标必与以前各行正交，并满足归一化条件§8(2)式或(5)式. 在表示 $T^{(2)}$、$T^{(3)}$和 $T^{(4)}$中，把类 $\mathscr{C}_2$、$\mathscr{C}_4$和 $\mathscr{C}_5$三类中任一类的特征标取作＋1，另两类的特征标取作－1，就可满足正交性关系. 这就完全确定了头四个表示的特征标. 只要利用列的正交性关系(6)或(7)式，就能得出第五行（表5）.

表5　群 C_{4v}的特征标表

表示 \ 类	$\mathscr{C}_1(E)$	$\mathscr{C}_2(C_4, C_4^3)$	$\mathscr{C}_3(C_4^2)$	$\mathscr{C}_4(m_x, m_y)$	$\mathscr{C}_5(\sigma_\mu, \sigma_\nu)$
$T^{(1)}$	1	1	1	1	1
$T^{(2)}$	1	−1	1	−1	1
$T^{(3)}$	1	−1	1	1	−1
$T^{(4)}$	1	1	1	−1	−1
$T^{(5)}$	2	0	−2	0	0

以上对群 C_{4v}所作的讨论是有普遍意义的，对其他群，我们总可以象上面指出的那样，毫不费力地得到第一行和第一列. 在一维表示的情况下，其余待填之数可充分利用群表确定. 在维数大于1的不可约表示情况下，可利用行和列的正交性关系.

§13　不可约表示的基函数的正交性

现在我们转而注意生成群的不可约表示的基函数的性质. 我

们将利用不可约表示的正交性关系§6(8)式证明，属于两个不等价不可约表示的基函数是正交的.

设函数$\varphi_k^{(i)}(r)$(以下省略函数的宗量r)按不可约表示$T^{(i)}$的第k行变换，函数$\psi_l^{(j)}$按不可约表示$T^{(j)}$的第l行变换，即

$$\left.\begin{aligned} T(A)\varphi_k^{(i)} &= \sum_m T_{mk}^{(i)}(A)\varphi_m^{(i)} \\ T(A)\psi_l^{(j)} &= \sum_n T_{nl}^{(j)}(A)\psi_n^{(j)} \end{aligned}\right\} \tag{1}$$

对所有$A\in G$成立. 又假定算符$T(A)$是幺正的，因而有

$$(\varphi_k^{(i)},\psi_l^{(j)}) = (T(A)\varphi_k^{(i)},T(A)\psi_l^{(j)}) \tag{2}$$

将(1)式代入上式得

$$\begin{aligned}(\varphi_k^{(i)},\psi_l^{(j)}) &= (\sum_m T_{mk}^{(i)}(A)\varphi_m^{(i)}, \sum_n T_{nl}^{(j)}(A)\psi_n^{(j)}) \\ &= \sum_m \sum_n T_{mk}^{(i)*}(A)T_{nl}^{(j)}(A)(\varphi_m^{(i)},\psi_n^{(j)})\end{aligned}$$

对所有$A\in G$成立. 如果假定每一个表示的基函数是正交归一的，对上式遍及群元素求平均，并利用正交性关系§6(8)，得

$$\begin{aligned}(\varphi_k^{(i)},\psi_l^{(j)}) &= \frac{1}{g}\sum_{A\in G}\sum_m \sum_n T_{mk}^{(i)*}(A)T_{nl}^{(j)}(A)(\varphi_m^{(i)},\psi_n^{(j)}) \\ &= \sum_m \sum_n \frac{1}{l_i}\delta_{ij}\delta_{mn}\delta_{kl}(\varphi_m^{(i)},\psi_n^{(j)}) \\ &= \frac{1}{l_i}\delta_{ij}\delta_{kl}\sum_m(\varphi_m^{(i)},\psi_m^{(j)}) \end{aligned} \tag{3}$$

上式表明，按照幺正的不可约表示变换的任何一对函数是正交的，除非它们按相同表示(或等价表示)的相同的行变换.

§14 表示的直积

1. 直积表示

考虑群G的两个(可约或不可约)表示$T^{(i)}$和$T^{(j)}$. 取这两个表示矩阵的直积

$$T_{kl,mn}^{(i\times j)}(A) = T_{km}^{(i)}(A)T_{ln}^{(j)}(A), \quad 对所有 A\in G \tag{1}$$

可以证明，直积 $T^{(i\times j)}$也是一个表示. 事实上，

$$
\begin{aligned}
[T^{(i\times j)}(A)T^{(i\times j)}(B)]_{kl,mn} &= \sum_{r,s} T^{(i\times j)}_{kl,rs}(A)T^{(i\times j)}_{rs,mn}(B) \\
&= \sum_{r,s} T^{(i)}_{kr}(A)T^{(j)}_{ls}(A)T^{(i)}_{rm}(B)T^{(j)}_{sn}(B) \\
&= \sum_{r} T^{(i)}_{kr}(A)T^{(i)}_{rm}(B) \sum_{s} T^{(j)}_{ls}(A)T^{(j)}_{sn}(B) \\
&= [T^{(i)}(A)T^{(i)}(B)]_{km}[T^{(j)}(A)T^{(j)}(B)]_{ln} \\
&= T^{(i)}_{km}(AB)T^{(j)}_{ln}(AB)] \\
&= T^{(i\times j)}_{kl,mn}(AB) \qquad (2)
\end{aligned}
$$

由此得
$$T^{(i\times j)}(A)T^{(i\times j)}(B) = T^{(i\times j)}(AB) \qquad (3)$$

这就证明了 $T^{(i\times j)}$是一个表示，即两个表示的直积是一个表示，记为

$$T^{(i\times j)} = T^{(i)} \otimes T^{(j)} \qquad (4)$$

2. 直积表示的特征标

直积表示的特征标由下式给出：

$$
\begin{aligned}
\chi^{(i\times j)}(A) &= \sum_{k,l} T^{(i\times j)}_{kl,kl}(A) = \sum_{k} T^{(i)}_{kk}(A) \sum_{l} T^{(j)}_{ll}(A) \\
&= \chi^{(i)}(A)\chi^{(j)}(A) \qquad (5)
\end{aligned}
$$

换句话说，对于一个给定的群元素，直积表示 $T^{(i\times j)}(A)$的特征标简单地就是这两个表示 $T^{(i)}(A)$和 $T^{(j)}(A)$的特征标之积.

3. 直积表示的约化

如果 $T^{(i)}$和 $T^{(j)}$是不可约的，一般地，维数为 l_il_j 的表示 $T^{(i\times j)}$未必是不可约的.

若 $T^{(i)}$和 $T^{(j)}$可约，则直积表示一定可约. 如果知道它的特征标，就可使之约化. 若

$$T^{(i\times j)} = \sum_{l} a_l T^{(l)} \qquad (6)$$

则从 § 9(5)式和本节(5)式可得

$$a_l = \frac{1}{g}\sum_{k} n_k \chi_k^{(l)*} \chi_k^{(i\times j)}$$

$$=\frac{1}{g}\sum_{k} n_k \chi_k^{(l)*}\chi_k^{(i)}\chi_k^{(j)} \tag{7}$$

作为例子，考虑群 D_3的表示的直积 $T^{(3)}\otimes T^{(3)}$. 从(5)式和表4可知，四维直积表示 $T^{(3\times 3)}$的特征标由下式给出

$$\chi^{(3\times 3)} = (4,0,1)$$

由(7)式可求得

$$a_1 = \frac{1}{6}\times(1\times 1\times 4+3\times 1\times 0+2\times 1\times 1)=1$$

$$a_2 = \frac{1}{6}\times(1\times 1\times 4+3\times(-1)\times 0+2\times 1\times 1)=1$$

$$a_3 = \frac{1}{6}\times(1\times 2\times 4+3\times 0\times 0+2\times(-1)\times 1)=1$$

于是 $$T^{(3\times 3)} = T^{(3)}\otimes T^{(3)} = T^{(1)}\oplus T^{(2)}\oplus T^{(3)} \tag{8}$$

4. 直积表示的基函数

只要取各不可约表示的基函数的所有可能的乘积就可得到直积表示的基函数. 例如，令$\{\varphi_1^{(i)},\varphi_2^{(i)},\cdots,\varphi_{l_i}^{(i)}\}$为不可约表示 $T^{(i)}$的基，$\{\psi_1^{(j)},\psi_2^{(j)},\cdots,\psi_{l_j}^{(j)}\}$是不可约表示 $T^{(j)}$的基，则表示 $T^{(i\times j)}=T^{(i)}\otimes T^{(j)}$有 l_il_j 个基函数

$$f_{kl} = \varphi_k^{(i)}\psi_l^{(j)}, \quad (1\leqslant k\leqslant l_i, \quad 1\leqslant l\leqslant l_j) \tag{9}$$

如果函数 $\varphi_k^{(i)}$ 按不可约表示 $T^{(i)}$的第 k 行变换，$\psi_l^{(j)}$ 按不可约表示 $T^{(j)}$的第 l 行变换，即有(1)式，则函数 $f_{kl}=\varphi_k^{(i)}\psi_l^{(j)}$ 按直积表示 $T^{(i)}\otimes T^{(j)}=T^{(i\times j)}$变换，即

$$T(A)\{\varphi_k^{(i)}\psi_l^{(j)}\} = \sum_{(m,n)=1}^{l_i,l_j} T_{mn,kl}^{(i\times j)}(A)\{\varphi_m^{(i)}\psi_n^{(j)}\} \tag{10}$$

注意到(1)式，则上式成为

$$\begin{aligned} T(A)\{\varphi_k^{(i)}\psi_l^{(j)}\} &= \sum_{m=1}^{l_i}\sum_{n=1}^{l_j} T_{mk}^{(i)}(A)T_{nl}^{(j)}(A)\{\varphi_m^{(i)}\psi_n^{(j)}\} \\ &= \sum_{m=1}^{l_i} T_{mk}^{(i)}(A)\varphi_m^{(i)}\sum_{n=1}^{l_j} T_{nl}^{(j)}(A)\psi_n^{(j)} \\ &= T(A)\varphi_k^{(i)}\cdot T(A)\psi_l^{(j)} \end{aligned}$$

其中最后一步用了(1)式. 上式显示出算符对直积空间的函数是如

何作用的. 由基函数$\{f_{kl}\}$张成的l_il_j维空间是分别由基函数$\{\varphi_k^{(i)}\}$和$\{\psi_l^{(j)}\}$张成的空间的直积.

§15 直积群的表示

1. 直积群的表示

在这一节,我们考虑两个相互对易的子群的直积群的表示.

设$H=\{E\equiv H_1,H_2,\cdots,H_h\}$和$K=\{E\equiv K_1,K_2,\cdots,K_k\}$分别是阶数为$h$和$k$的两个群,$H$的所有元素与$K$的所有元素对易. 把它们的$g=hk$阶直积群记作$G=H\otimes K=\{E\equiv G_{11},G_{12},\cdots,G_{1k},G_{21},\cdots,G_{hk}\}$,其中

$$G_{ij}=H_iK_j,\quad G_{mn}=H_mK_n,\quad G_{pq}=H_pK_q \tag{1}$$

令$H_iH_m=H_p,K_jK_n=K_q$,则

$$\begin{aligned}G_{ij}G_{mn}&=(H_iK_j)(H_mK_n)\\&=(H_iH_m)(K_jK_n)\\&=H_pK_q=G_{pq}\end{aligned} \tag{2}$$

令$T^{(h)}$是H的一个表示,$T^{(k)}$是K的一个表示,即

$$\left.\begin{aligned}T^{(h)}(H_i)T^{(h)}(H_m)&=T^{(h)}(H_p)\\T^{(k)}(K_j)T^{(k)}(K_n)&=T^{(k)}(K_q)\end{aligned}\right\} \tag{3}$$

由群H和群K的表示矩阵$T^{(h)}(H_p)$和$T^{(k)}(K_q)$的直积可定义一个新的矩阵

$$T^{(g)}(G_{pq})=T^{(h)}(H_p)\otimes T^{(k)}(K_q) \tag{4}$$

可以证明,矩阵$T^{(g)}(G_{pq})$的集合构成直积群G的一个表示. 事实上,从(4)式、(3)式及第二章§12(16)式可得

$$\begin{aligned}T^{(g)}(G_{pq})&=T^{(h)}(H_p)\otimes T^{(k)}(K_q)\\&=[T^{(h)}(H_i)T^{(h)}(H_m)]\otimes[T^{(k)}(K_j)T^{(k)}(K_n)]\\&=[T^{(h)}(H_i)\otimes T^{(k)}(K_j)][T^{(h)}(H_m)\otimes T^{(k)}(K_n)]\\&=T^{(g)}(G_{ij})T^{(g)}(G_{mn})\end{aligned} \tag{5}$$

比较(2)式与(5)式可知,$T^{(g)}(G_{pq})$的集合确是一个表示,称为直积群$G=H\otimes K$的表示$T^{(g)}$. 因此,两个相互对易的群的表示的直积

是其直积群的一个表示，即

$$T^{(g)} = T^{(h)} \otimes T^{(k)} \tag{6}$$

2. 直积群表示的特征标

容易证明，(6)式所示的直积群表示的特征标是 $T^{(h)}$和 $T^{(k)}$的特征标的乘积. 事实上，对元素 $G_{ij}=H_iK_j$，有

$$\begin{aligned}\chi^{(g)}(G_{ij}) &= \sum_{m,n} T^{(g)}_{mn,mn}(G_{ij}) \\ &= \sum_{m,n} T^{(h)}_{mm}(H_i) T^{(k)}_{nn}(k_j) \\ &= \chi^{(h)}(H_i)\chi^{(k)}(K_j)\end{aligned} \tag{7}$$

直积群表示的特征标表容易得到，行和列用一对关于子群 H 和 K 的指标标记，表中每一个行列交叉位置的数由每一子群的特征标表的对应项相乘得到.

例如，考虑两个二阶群 $H=\{E,m_x\}$和 $K=\{E,m_y\}$，和以前一样，m_x 和 m_y 分别代表对 x 轴和 y 轴的反射. 因为 m_x 与 m_y 对易，可以取 H 和 K 的直积得到一个四阶群 $G=H\otimes K$，其元素为 $E, A=Em_y=m_y, B=m_xE=m_x, C=m_xm_y$. 可由 H 和 K 的特征标表直接得到 G 的特征标表如下.

表 6

H	E	m_x
$T_1^{(h)}$	1	1
$T_2^{(h)}$	1	-1

表 7

K	E	m_y
$T_1^{(k)}$	1	1
$T_2^{(k)}$	1	-1

表 8

$G=H\otimes K$	E	A	B	C
$T_{11}^{(g)}$	1	1	1	1
$T_{12}^{(g)}$	1	-1	1	-1
$T_{21}^{(g)}$	1	1	-1	-1
$T_{22}^{(g)}$	1	-1	-1	1

3. 直积群表示是不可约表示的条件

可以证明,若 $T^{(h)}$和 $T^{(k)}$分别是 H 和 K 的不可约表示,则直积 $T^{(g)}=T^{(h)}\otimes T^{(k)}$是 K 的不可约表示. 根据不可约表示的判据 § 10 (3)式,对 H 和 K 我们有

$$\left.\begin{aligned}\sum_{H_i\in H}\chi^{(h)}(H_i)\chi^{(h)*}(H_i)=h\\ \sum_{K_j\in G}\chi^{(k)}(G_j)\chi^{(k)*}(G_j)=k\end{aligned}\right\}\tag{8}$$

取上面两个等式两边的积,得到

$$\sum_{H_i\in H}\sum_{K_j\in G}[\chi^{(h)}(H_i)\chi^{(k)}(G_j)][\chi^{(h)*}(H_i)\chi^{(k)*}(G_j)]=hk=g$$

注意到(7)式,上式化为

$$\sum_{G_{ij}\in G}\chi^{(g)}(G_{ij})\chi^{(g)*}(G_{ij})=g\tag{9}$$

上式满足 § 10(3)式,故 $T^{(g)}$是直积群 G 的不可约表示.

若 H 的表示 $T^{(h)}$或 K 的表示 $T^{(k)}$是可约的,则直积表示 K 是可约的.

4. 直积群的所有不可约表示都是其子群的不可约表示的直积

现在我们证明,G 的所有的不可约表示都是 H 和 K 的不可约表示的直积. 令 H 的不可约表示有 C_h 个,维数分别为 $l_1^{(h)},l_2^{(h)},\cdots,l_{c_h}^{(h)}$,而 K 有 C_k 个不可约表示,维数分别是 $l_1^{(k)},l_2^{(k)},\cdots,l_{c_k}^{(k)}$,于是由 § 11(10)式,有

$$\sum_{i=1}^{C_h}[l_i^{(h)}]^2=h$$

$$\sum_{j=1}^{C_k}[l_j^{(k)}]^2=k$$

我们知道,直积群 G 的不可约表示的维数是

$$l_{ij}^{(g)}=l_i^{(h)}l_j^{(k)}$$

现在考虑 G 的不可约表示维数的平方和:

$$\sum_{i=1}^{C_h}\sum_{j=1}^{C_k}[l_{ij}^{(g)}]^2=\sum_{i=1}^{C_h}\sum_{j=1}^{C_k}[l_i^{(h)}]^2[l_j^{(k)}]^2$$

$$=hk=g$$

或写成
$$\sum_{n=1}^{C_h C_k}[l_n^{(g)}]^2 = g \tag{10}$$
式中采用记号 $l_n^{(g)} \equiv l_{ij}^{(g)}$ 代表 G 的不可约表示的维数. 若以 C_g 代表 G 的不可约表示的个数,则有
$$C_g = C_h C_k$$
以上结果表明,H 和 K 的不可约表示的直积穷尽了(包含了)G 的所有不可约表示,亦即没有一个 G 的不可约表示不能表为 H 和 K 的不可约表示的直积. 这一结果在直积群中非常重要. 因为如果 G 可以表为两个或多个子群的直积时,它将帮助我们由较小的群的不可约表示构造较大群 G 的全部不可约表示.

5. 直积群表示的基函数

G 的可约或不可约表示 $T^{(g)}$ 的基函数,可以取为 H 和 K 的相应表示 $T^{(h)}$ 和 $T^{(k)}$ 的基函数的乘积. 换言之,表示 $T^{(g)}$ 的希尔伯特空间正好是表示 $T^{(h)}$ 和 $T^{(k)}$ 的希尔伯特空间的直积.

让我们以 $\{\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_a\}$ 代表 $T^{(h)}$ 的 $l^{(h)} \equiv a$ 个基函数,以 $\{\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_b\}$ 代表 $T^{(k)}$ 的 $l^{(k)} \equiv b$ 个基函数. 于是 G 的表示 $T^{(g)} = T^{(h)} \otimes T^{(k)}$ 有 ab 个基函数 $\{f_{mn}\}$,其中
$$f_{mn} = \varphi_m \psi_n, \quad 1 \leqslant m \leqslant a, \quad 1 \leqslant n \leqslant b \tag{12}$$
若 G 的元素为 $G_{pq} = H_p K_q$,则其表示算符对函数 f_{mn} 的作用由下式给出:
$$\begin{aligned} T(G_{pq})\varphi_m\psi_n &= T(G_{pq})f_{mn} \\ &= \sum_{r,s=1}^{a,b} T_{rs,mn}^{(g)}(G_{pq})f_{rs} \\ &= \sum_{r,s=1}^{a,b} [T_{rm}^{(h)}(H_p)T_{sn}^{(k)}(K_q)]\varphi_r\psi_s \\ &= \sum_{r=1}^{a} T_{rm}^{(h)}(H_p)\varphi_r \sum_{s=1}^{b} T_{sn}^{(k)}(K_q)]\psi_s \\ &= T(H_p)\varphi_m T(K_q)\psi_n \end{aligned} \tag{13}$$
可见,两个因子群的算符只作用于它们各自的希尔伯特空间.

§16 广义投影算符

对于群 G，有一个表示空间，若群的第 j 个不可约表示 $T^{(j)}$ 的基函数是 $\{\varphi_k^{(j)}\}$，则

$$T(A)\varphi_k^{(j)} = \sum_s T_{sk}^{(j)}(A)\varphi_s^{(j)}$$

其中 $\varphi_k^{(j)}$ 称为不可约表示 $T^{(j)}$ 的第 k 列基函数，因为它与 $T^{(j)}$ 的第 k 列矩阵元有关.

将上式两边乘以 $T_{mn}^{(i)*}(A)$ 并对群元素 A 取和，利用正交性关系 §6(8)式，得

$$\begin{aligned}\sum_{A\in G} T_{mn}^{(i)*}(A)T(A)\varphi_k^{(j)} &= \sum_s \sum_{A\in G} T_{mn}^{(i)*}(A)T_{sk}^{(j)}(A)\varphi_s^{(j)} \\ &= \sum_s \frac{g}{l_i}\delta_{ij}\delta_{ms}\delta_{nk}\varphi_s^{(j)} \\ &= \frac{g}{l_i}\delta_{ij}\delta_{nk}\varphi_m^{(j)}\end{aligned}$$

或

$$\frac{l_i}{g}\sum_{A\in G} T_{mn}^{(i)*}(A)T(A)\varphi_k^{(j)} = \delta_{ij}\delta_{nk}\varphi_m^{(j)} \tag{1}$$

定义广义投影算符为

$$P_{mn}^{(i)} = \frac{l_i}{g}\sum_{A\in G} T_{mn}^{(i)*}(A)T(A) \tag{2}$$

则有

$$P_{mn}^{(i)}\varphi_k^{(j)} = \delta_{ij}\delta_{nk}\varphi_m^{(j)} \tag{3}$$

从上式可以看出投影算符的几个性质：

(1)投影算符 $P_{mn}^{(i)}$ 作用到第 $j(j\neq i)$ 个不可约表示 $T^{(j)}$ 的任何基函数 $\varphi_k^{(j)}$ 上结果都是零.

(2)投影算符 $P_{mn}^{(i)}$ 作用到第 i 个不可约表示 $T^{(i)}$ 的其他列(k 列，$k\neq n$)的基函数 $\varphi_k^{(i)}$ 上，结果也是零.

(3)投影算符 $P_{mn}^{(i)}$ 只有作用到第 i 个不可约表示 $T^{(i)}$ 的第 n 列的基函数 $\varphi_n^{(i)}$ 上，结果才不为零，这时得出的结果是第 m 列的基函数 $\varphi_m^{(i)}$.

(4)当 $m=n$ 时，$P_{nn}^{(i)}$ 作用到 $\varphi_n^{(i)}$ 上仍得出 $\varphi_n^{(i)}$.

设表示空间的任一矢量(函数)Φ为

$$\Phi = \sum_{k,j} C(k,j)\varphi_k^{(j)}$$

将广义投影算符$P_{mn}^{(i)}$作用于上式,并注意到(3)式则有

$$\begin{aligned} P_{mn}^{(i)}\Phi &= \sum_{k,j} C(k,j) P_{mn}^{(i)}\varphi_k^{(j)} \\ &= \sum_{k,j} C(k,j)\delta_{ij}\delta_{nk}\varphi_m^{(j)} \\ &= C(n,j)\varphi_m^{(i)} \end{aligned} \tag{4}$$

因此,在表示空间的任一矢量(函数)Φ受到$P_{mn}^{(i)}$作用时,只有线性地包含在Φ中的$\varphi_n^{(i)}$这一部分能够接受它的作用而不为零,Φ中其他成分受它作用后一律为零.因为$P_{mn}^{(i)}$作用在函数的线性组合上具有从中挑选出某一确定函数的作用,故称$P_{mn}^{(i)}$为投影算符.$P_{nn}^{(i)}$选择出$\varphi_n^{(i)}$并得出$\varphi_n^{(i)}$,而$P_{mn}^{(i)}$选择出$\varphi_n^{(i)}$加以作用,得出结果$\varphi_m^{(i)}$.

由此立即看到投影算符的一个用处.如果已知群的一个不可约表示矩阵$T_{mn}^{(i)}(A)$,那么就确定了$P_{mn}^{(i)}$.这时只要知道这个表示的一个列的基函数,例如$\varphi_n^{(i)}$,我们就可以用投影算符作用在这个基函数上而得到$T^{(i)}$的属于其它各列的基函数$\varphi_m^{(i)}, m=1,2,\cdots\cdots$.

甚至当$T^{(i)}$的基函数我们一个也不知道的情况下,在表示空间中随便取一个矢量,只要其中包含有$\varphi_n^{(i)}$,则用投影算符作用于此矢量时就能选出其中的$\varphi_n^{(i)}$,从而可以求出全部的基函数.

如果我们有一个群的一个可约表示,通过特征标的讨论可以知道这个可约表示约化为哪些不可约表示,至于其中的某一个不可约表示的基函数是什么,不必在表示空间中具体寻找不变子空间,这样做往往是费力的.我们只要利用投影算符,立即可以在原来的可约的表示空间中,选用指定的不可约表示的基函数.

第四章　连续群及其表示

在第一章中，介绍了有限群和无限群的概念，我们已经知道，元素数目有限的群称为有限群，而元素数目无限的群则称为无限群. 无限群又分为两类，即

分立的无限群——群元素数目是可数无限的；

连续的无限群——群元素数目是不可数无限的.

第一章和第三章关于群和有限群表示理论对分立的无限群仍有效. 但当我们处理连续群时则要作一些修正，并且要引入许多新的概念，例如无穷小生成元和无穷小算符，李群和李代数，等等. 本章讨论连续群及其表示理论.

§1　连续群和李群

1. 连续群

连续群的元素可以用一组实参数 $a_1, a_2, \cdots, a_n$ 表征，记为 $G(a_1, a_2, \cdots, a_n)$，其中至少有一个参数在一定的区间上连续地变化，这组参数对表征群的全部元素应该是充分且必要的. 设连续参数数目为 $r(1 \leqslant r \leqslant n)$，若 r 是有限的，则称 r 为连续群的阶(order)或维(dimension)，这时，连续群是有限维的.

连续群的例子.

［例 1］全部实数的集合组成一阶连续群. 因为任何实数可由一个参数(例如 x)表征，x 在区间〔$-\infty, \infty$〕上取值.

［例 2］考虑变数 x 的如下线性变换

$$x' = ax + b, \quad a, b \in (-\infty, \infty), \quad a \neq 0 \tag{1}$$

所有这种变换的集合是一个二参数的群，其元素可记为

$$T(a, b)x = x' = ax + b \tag{2}$$

我们来考察群的组合律. 注意到

$$\begin{aligned}T(a_1,b_1)T(a_2,b_2)x &= T(a_1,b_1)(a_2x+b_2)\\ &= a_1(a_2x+b_2)+b_1\\ &= a_1a_2x+(a_1b_2+b_1)\end{aligned} \tag{3}$$

因而 $$T(a_3,b_3) = T(a_1,b_1)T(a_2,b_2) = T(a_1a_2,a_1b_2+b_1) \tag{4}$$

故组合律为

$$a_3 = a_1a_2, \qquad b_3 = a_1b_2+b_1 \tag{5}$$

由(2)式可以看出,恒等元是 $T(1,0)$,这是因为

$$T(1,0)x = x \tag{6}$$

而且,$T(a,b)$的逆 $T^{-1}(a,b)$由下式给出

$$T(c,d) \equiv T^{-1}(a,b) = T(\frac{1}{a},\frac{-b}{a}) \tag{7}$$

即 $$c = \frac{1}{a}, \qquad d = \frac{-b}{a} \tag{8}$$

值得注意,(5)式中 a_3 和 b_3 是 a_1,b_1,a_2,b_2 的解析函数,(8)式中 c 和 d 是 a 与 b 的解析函数.

[例 3] 三维实矢量空间中,所有形如

$$x' = x+a, \quad y' = y+b, \quad z' = z+c \tag{9}$$

的位移的集合是一个三参数的连续群. 如果用 $T(a,b,c)$记平移算符,则恒等元记为 $T(0,0,0)$,而 $T(a,b,c)$的逆是

$$T^{-1}(a,b,c) = T(-a,-b,-c) \tag{10}$$

[例 4] 考虑两个变数的齐次线性变换

$$\left.\begin{aligned}x' &= a_{11}x+a_{12}y\\ y' &= a_{21}x+a_{22}y\end{aligned}\right\} \tag{11}$$

其矢量形式为

$$r' = Ar \tag{12}$$

其中 $$\det A = |a_{ij}| \neq 0 \tag{13}$$

当满足条件(13)式时,取所有可能的实数值 a_{ij},便得到变换(11)式. 所有这样的变换的集合是一个四参数的连续群,称为二维线性群,记为 $GL(2)$. 此群与所有二阶非奇矩阵组成的群同构.

［例5］考虑 n 个变数的线性齐次变换(例4的推广)：

$$x'_j = \sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j, \quad 1 \leqslant i \leqslant n, \quad |a_{ij}| \neq 0 \tag{14}$$

所有这样的变换的集合是一个 n^2 个参数的连续群，称为 n 维线性群，记为 $GL(n)$. 此群与所有 n 阶非奇异矩阵组成的群同构.

［例6］绕一个轴的所有转动的集合是一阶连续群，记为 SO_2 或 $SO(2)$. 其参数可选为转动角 θ，取值区间为 $(-\pi,\pi)$ 或 $(0,2\pi)$.

［例7］绕三维空间一固定点的所有轴的转动的集合是一个三阶连续群，记为 SO_3 或 $SO(3)$，群元素可用欧拉(Euler)角 α,β,γ 表征.

2. 李群

设连续群的元素 $x_1,x_2,\cdots$ 依赖于 r 个参数，可表为明显形式：

$$x_1 \equiv x_1(a,a_2,\cdots,a_r), \quad x_2 = x_2(b_1,b_2,\cdots,b_r),\cdots,$$

群元素的乘积及逆表为

$$x_1x_2 \equiv x_3(c_1c_2,\cdots,c_r) \tag{15}$$

$$x_1^{-1} = x_4(d_1,d_2,\cdots,d_r) \tag{16}$$

它们也是群的一个元素. 因此，新参数 c_i 和 d_i 必须表示为 a_i 和 b_i 的函数

$$c_i \equiv c_i(a_1,a_2,\cdots,a_r;b_1,b_2,\cdots,b_r) \tag{17}$$

$$d_i \equiv d_i(a_1,a_2,\cdots,a_r) \tag{18}$$

其中 $1 \leqslant i \leqslant r$. 如果 c_i 是 a_i 和 b_i 的解析函数，d_i 是 a_i 的解析函数，则称此连续群为 r 维李群(Lie group).

如果取群中任一元素并连续地改变其参数可以使它变到恒等元素，则称此李群是连通的(connected). 如果群的元素的每一个无穷序列都在群内有极限元素，则称此李群是紧致的(compact). 一个群如果有非平庸的不变子群，则称为简单群(simple group). 一个群虽有不变子群，但其中没有一个是阿贝尔群，则称为半简单群(semisimple group). 单群和半单群的概念用于李群时，必须加上分立的不变子群不连通的条件.

可以证明，任何半简单的、连通的李群可以看作是简单李群的

直积，而且，任何非简单的、连通的、紧致的李群可以看作是半单群与一个参数的紧致群的直积①. 所以，今后我们将限于讨论简单的、连通的、紧致的李群，简称为李群.

在第三章讨论过的正交性关系及由它而得的所有结果，对紧致群仍然有效. 特别是，表示的概念，不可约性和特征标的概念都不变. 表示的矩阵元和特征标应该是群参数的连续函数 $D_{ij}^{(\alpha)}(a_1,a_2,\cdots,a_r)$ 和 $\chi^{(\alpha)}(a_1,a_2,\cdots,a_r)$. 对连续群，人们不再有有限的特征标表，因为连续群的类数是无穷的，并且象群元素本身那样，类也是连续分布的. 虽然不可约表示一般是有限的，但不等价不可约表示的数目也是无限的，不可约表示的数目无限意味着任一函数按属于不可约表示的函数展开时项数是无限的.

§2 连续群的生成元和无穷小算符

1. 生成元

参数为 $a_1,a_2,\cdots,a_r$ 的 r 维连续群具有无穷多个群元素，但是群的大部分性质则可由有限个(r 个)算符推出. 为了得到这些无穷小算符，我们先讨论群的无穷小生成元.

选取李群的连续参数比较方便的方法是：使单位元的象是参数空间的原点，即

$$x(0,0,\cdots,0)\equiv e \tag{1}$$

如果这样选取参数，则由于李群的解析性质，靠近单位元的元素可以写作

$$\begin{aligned}x(0,0,\cdots,\varepsilon_j,\cdots,0) &\simeq x(0,0,,0)+i\varepsilon_j I_j(0,0,\cdots,0)\\&=e+i\varepsilon_j I_j\end{aligned} \tag{2}$$

此式准确到 ε_j 的一级近似，参数 ε_j 为实数，且 $|\varepsilon_j|\ll 1$. 由上式可求得

---

① 任何一个参数的群都是阿贝尔群. 例如参阅 Roman, Advanced Quantum Theory, Appendix 2, P. 665.

$$I_j = \lim_{\varepsilon_j \to 0}\left[\frac{1}{i\varepsilon_j}\{x(0,\cdots,\varepsilon_j,\cdots,0) - x(0,0,\cdots,0)\}\right] \tag{3}$$

李群的全部性质可由这 r 个算符 $I_j(1 \leqslant j \leqslant r)$ 推出，而它们只需在群的单位元附近加以定义.

通过相继应用乘法法则，我们可以得到与单位元相隔一有限距离的群元素. 例如我们希望生成群的元素 $x(0,\cdots,a_j,\cdots,0)$，让我们把 a_j 写作 $a_j = N\varepsilon_j$，这里 N 是一个大的正整数，使得 ε_j 是一个小量. 于是

$$\begin{aligned} x(0,\cdots,a_j,\cdots,0) &= [x(0,\cdots,\varepsilon_j,\cdots,0)]^N \\ &= [e + i\varepsilon_j I_j]^N \\ &= [e + i\frac{a_j}{N} I_j]^N \end{aligned} \tag{4}$$

让 N 趋于无穷，利用代数恒等式

$$\lim_{N \to \infty}(1 + \frac{x}{N})^N = e^x$$

则(4)式可化为

$$x(0,\cdots,a_j,\cdots,0) = e^{ia_j I_j} \tag{5}$$

这个结果是准确的. 上式右边的指数函数应理解为与 I_j 的幂级数展开形式上等价.

我们可以把上述结果推广到群的一般元素

$$x(a_1,a_2,\cdots,a_r) = \exp\left[\sum_{j=1}^{r} ia_j I_j\right] \tag{6}$$

赋于诸参数 a_j 在各自指定的变化区间上的各种值，我们可以得到李群包含单位元的子集中的所有元素. 因而把 r 个算符 $I_j(1 \leqslant j \leqslant r)$ 称为李群的无穷小生成元(infinitesimal generators)，它与参数无关. 显然，具有 r 个连续参数的李群有 r 个生成元.

无穷小生成元具有如下关系：

$$[I_\mu, I_\nu] = \sum_{\lambda=1}^{r} C_{\mu\nu}^{\lambda} I_\lambda, \quad \mu,\nu = 1,2,\cdots,r \tag{7}$$

称为 Lie-Cartan 关系，其中系数 $C_{\mu\nu}^{\lambda}$ 称为群的结构常数，具有如下性质：

$$C^{\lambda}_{\mu\nu} = - C^{\lambda}_{\nu\mu} \tag{8}$$

$$C^{s}_{\mu\nu}C^{t}_{\lambda\theta} + C^{s}_{\nu\theta}C^{t}_{\lambda\mu} + C^{s}_{\theta\mu}C^{t}_{\lambda\nu} = 0 \tag{9}$$

给定满足(8)和(9)式的任何一组结构常数，无穷小生成元就被唯一地确定，并且通过这些生成元唯一地确定李群.

2. 无穷小算符

如果我们限于讨论连通的、紧致的李群，则有如下的定理(只陈述，不证明)：李群的每一个表示都是幺正的(或有等价的幺正表示)，因为它们或是不可约的，或是完全可约的. 这样，在任何表示中，群元素(2)和(6)式的象可以分别写作

$$D(E) = E + i\sum_{j}\varepsilon_j I_j, \quad |\varepsilon| \ll 1 \tag{10}$$

$$D(a) = \exp(i\sum_{j=1}^{r} a_j I_j) \tag{11}$$

其中 I_j 是无穷小生成元的表示(用相同的符号)，称为无穷小算符(infinitesimal operators)，它们是 $d\times d$ 维矩阵，而 d 是表示的维数，E 是 $d\times d$ 维单位矩阵.

因为 $D(a)$ 是幺正的，而 a_j 又是实数，故 I_j 必是厄密的. 事实上，由幺正条件及(10)式，我们有

$$\begin{aligned} 1 = D^{+}D &= (1 + i\sum\varepsilon_j I_j)^{+}(1 + i\sum\varepsilon_j I_j) \\ &= (1 - i\sum\varepsilon_j I_j^{+})(1 + i\sum\varepsilon_j I_j) \\ &\simeq 1 + i\sum\varepsilon_j(I_j - I_j^{+}) \end{aligned}$$

由此得

$$I_j^{+} = I_j, \quad j = 1, 2, \cdots, r \tag{12}$$

可见，无穷小算符是厄密的.

下面陈述几个关于无穷小算符的定理，不作证明.

定理 如果一个群有两个表示，它们具有相同的无穷小算符，那么这两个表示是相同的表示.

定理 对群的任何表示，无穷小算符 I_j 满足(7)式表示的对易关系，即李群的无穷小算符的对易子是其无穷小算符的线性组合. 类似于有限群的乘法表，李群的无穷小算符的对易子完全确定

李群的结构，故系数 C_{jk}^{m} 称为李群的结构常数，它们是李群的固有性质，与表示无关，即对群的所有表示，它们都是相同的．然而它们不是唯一的，因为李群的生成元本身不是唯一的．

定理 算符 I_j 的集合如果满足(7)式，则它们是群的无穷小算符．

由以上定理可推知，如果群已给定，即如果结构常数全部已确定，那末求李群的 d 维表示的问题就变成求满足(7)式的 r 个矩阵 $I_1, I_2, \cdots, I_r$ 的集合，其中每一个矩阵具有 d 行和 d 列．

从以上定理还可知道，连续群的研究比有限群更为简便，因为只须研究无穷小算符代数．在某种意义上，群表被结构常数所代替．

如果定义无穷小生成元的对易子$[I_\mu, I_\nu]$为“李乘积”，则由(7)式可知，李群的无穷小生成元组成的集合，在李乘积下是封闭的．我们称这个集合为李代数(Lie algebra)．这就是说，我们把线性无关的 r 个无穷小生成元 I_j 看作是李代数的基(basis)．这些基元素的任何线性组合被认为是李代数的一个元素．李代数和李群是一一对应的．李代数的重要性在于这样一个事实：研究李代数的一个矩阵表示，就能生成李群的一个表示．例如，若我们能找到一组 r 个 d 阶方阵，它们满足具有给定结构常数的对易关系(7)式，则把它们当作 I_j 代入(11)式，就可生成李群的一个 d 维表示．我们可以把它当作一个一般法则：李代数的一个表示可用以生成相应李群的一个表示．因此对李群的研究可以通过对李代数的研究而实现，具有相同的李代数的诸李群彼此定域地同构(locally isomorphism)．因此，通过对李代数的研究可以对李群的性质有相当充分的了解．

与李代数所有算符都对易(即李乘积为零)的算符，称为卡塞米尔(Casimir)算符，用 C 表示，即有

$$[C, I_j] = 0, \quad j = 1, 2, \cdots, r \tag{13}$$

李代数中彼此对易的算符的最大个数称为李代数的秩(rank)．秩为 l 的李代数有 l 个卡塞米尔算符．

在许多情况下，利用无穷小生成元适当的线性组合作基是方便的．在这个基中，Lie-Cartan 关系取 Ionides 形式：

$$[I_\mu, I_\nu] = i\sum_{\lambda=1}^{r} f_{\mu\nu\lambda} I_\lambda, \quad \mu,\nu = 1,2,\cdots,r \tag{14}$$

其中所有的 $f_{\mu\nu\lambda}$是实数，并且对三个指标 μ、ν、λ 是完全反对称的．$if_{\mu\nu\lambda}$只是在特殊的基中结构常数的特殊记号．在这个特殊形式中，全部无穷小生成元都是厄密的．

例如，群 SO_3 的无穷小生成元为

$$\left.\begin{aligned} I_1 &= -x_2\frac{\partial}{\partial x_3} + x_3\frac{\partial}{\partial x_2} \\ I_2 &= -x_3\frac{\partial}{\partial x_1} + x_1\frac{\partial}{\partial x_3} \\ I_3 &= -x_1\frac{\partial}{\partial x_2} + x_2\frac{\partial}{\partial x_1} \end{aligned}\right\} \tag{15}$$

其 Lie-Cartan 关系为

$$\left.\begin{aligned} [I_1, I_2] &= I_3 \\ [I_2, I_3] &= I_1 \\ [I_3, I_1] &= I_2 \end{aligned}\right\} \tag{16}$$

但 I_1, I_2, I_3 不是厄密的．如果令

$$L_x = iI_1, \quad L_y = iI_2, \quad L_z = iI_3 \tag{17}$$

则 Lie-Cartan 关系的 Ionides 形式为

$$\left.\begin{aligned} [L_x, L_y] &= iL_z \\ [L_y, L_z] &= iL_x \\ [L_z, L_x] &= iL_y \end{aligned}\right\} \tag{18}$$

这是角动量算符所满足的代数关系．显然，L_x, L_y, L_z 是厄密的．

由(16)式或(18)式可知，群 SO_3 李代数的秩 $l=1$，因而有一个卡塞 米尔算符．注意到 $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ 与 L_x, L_y, L_z 均对易，故 L^2 就是卡塞米尔算符．

不难验证，

$$L_1 = i\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, L_2 = i\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, L_3 = i\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{19}$$

满足(18)式(其中 x,y,z 分别换成 1,2,3),即(19)式表示的 3×3 矩阵满足群 SO_3 的无穷小生成元 L_x, L_y, L_z 所满足的代数式,故(19)式所示的 3×3 矩阵是群 SO_3 的无穷小生成元的一个三维表示,即是群 SO_3 的无穷小算符.

又如群 SU_2 的无穷小生成元为

$$\left.\begin{aligned} I_1 &= -i\left(x_1\frac{\partial}{\partial x_1} - x_2\frac{\partial}{\partial x_2}\right) \\ I_2 &= \left(x_1\frac{\partial}{\partial x_2} - x_2\frac{\partial}{\partial x_1}\right) \\ I_3 &= -i\left(x_1\frac{\partial}{\partial x_2} + x_2\frac{\partial}{\partial x_1}\right) \end{aligned}\right\} \tag{20}$$

其 Lie-Cartan 关系为

$$\left.\begin{aligned} [I_1, I_2] &= 2I_3 \\ [I_2, I_3] &= 2I_1 \\ [I_3, I_1] &= 2I_2 \end{aligned}\right\} \tag{21}$$

若令
$$J_1 = \frac{i}{2}I_1, \quad J_2 = \frac{i}{2}I_2, \quad J_3 = \frac{i}{2}I_3 \tag{22}$$

则 Lie-Cartan 关系的 Ionides 形式为

$$\left.\begin{aligned} [J_1, J_2] &= iJ_3 \\ [J_2, J_3] &= iJ_1 \\ [J_3, J_1] &= iJ_2 \end{aligned}\right\} \tag{23}$$

比较(18)式和(23)式可以看出,群 SO_3 的李代数与群 SU_2 的李代数相同,它们彼此同构.实际上,秩 $l=1$ 的李代数只有一种.

不难验证,

$$I_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \ I_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \ I_3 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{24}$$

满足
$$[I_j, I_k] = i\varepsilon_{jkl}I_l \tag{25}$$

与(23)式一致,故(24)式所示 2×2 矩阵是群 SU_2 李代数的二维矩阵表示,亦即群 SU_2 的无穷小算符. 设 $\tau_j = 2I_j$,则

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{26}$$

就是泡利(Pauli)矩阵.

§3 轴转动群 SO_2

1. 轴转动群

有一个圆,绕垂直于它所在的平面并通过其圆心的轴作旋转,各种不同角度的转动形成一个集合,这个集合的每一个元素可以用一个参数标明,我们可以选定这个参数为区间[0,2π]上取值的转角 φ. 很明显,这个集合是一个单参数的、连续的、连通的、紧致的李群,而且是一个阿贝尔群,称为轴转动群,记作 SO_2 或 $SO(2)$. 因为旋转 φ 与旋转 $\varphi+2\pi n$(n 是整数)相同,故参数空间是实数轴的子集[0,2π].

如果我们以 $R(\varphi)$ 代表此群的元素,则组合法则是:

$$R(\varphi)R(\theta) = \begin{cases} R(\varphi+\theta), & \text{当 } \varphi+\theta < 2\pi \\ R(\varphi+\theta-2\pi), & \text{当 } \varphi+\theta \geqslant 2\pi \end{cases} \tag{1}$$

即如果 $R(\gamma)=R(\varphi)R(\theta)$,则 $\gamma=\varphi+\theta$(当 $\gamma<2\pi$),或 $\gamma=\varphi+\theta-2\pi$(当 $\varphi+\theta\geqslant 2\pi$ 时).

此群的单位元是 $R(0)$,而 $R(\varphi)$ 的逆元是 $R(2\pi-\varphi)$.

2. 不可约表示

圆所在的平面内的笛卡儿坐标系 (x,y) 在群 SO_2 的旋转下的变换,可以生成群的一个表示. 元素 $R(\varphi)$ 对 (x,y) 的作用由下式给出:

$$R(\varphi)\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi \\ -\sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \tag{2}$$

上式右边的变换矩阵是二阶正交矩阵. 群的每一个元素 $R(\varphi)$ 对应着一个行列式为 +1 的 2×2 正交矩阵,这种对应显然是一对一

的.所有行列式为$+1$的二阶正交矩阵的集合是一个群,它与轴转动群同构,故提供了群SO_2的一个二维表示.此矩阵群也用同一个符号SO_2记之.

因为轴转动群是阿贝尔群,它的全部不可约表示都应是一维的.为求出所有这种不可约表示,我们必须求出满足

$$\left.\begin{aligned} T(\varphi+\theta) &= T(\varphi)T(\theta) \\ T(0) &= 1 \end{aligned}\right\} \tag{3}$$

的$T(\varphi)$.上式固定φ相对于θ求微分,得到

$$T'(\varphi+\theta) = T(\varphi)T'(\theta)$$

然后令$\theta=0$,得

$$T'(\varphi) = T(\varphi)T'(0)$$

或

$$\frac{T'(\varphi)}{T(\varphi)} = T'(0)$$

上式是关于$T(\varphi)$的微分方程,其解为

$$T(\varphi) = e^{\varphi T'(0)} \tag{4}$$

上式已满足$T(0)=1$.这样,我们便得出结论:群SO_2的不可约表示是转动角φ的指数,仅当$T'(0)$是纯虚整数时,$T(\varphi)=T(\varphi+2\pi)$.因此,通常定义:

$$m = -iT'(0), \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$$

使得SO_2的连续的不可约表示成为

$$T(\varphi) = e^{im\varphi} \tag{5}$$

显然,这样的表示是幺正的.对于m的每一个整数值,我们有一个由(5)式给出的SO_2的不可约表示.

注意,若$m=\pm\frac{1}{2},\pm\frac{3}{2},\cdots$,那么,我们可以得到在$0\leqslant\varphi\leqslant4\pi$上连续的幺正表示,因而在通常的范围$0\leqslant\varphi\leqslant2\pi$内,表示将是双值的(double value).这样的双值表示在量子力学的自旋描述中是需要的.

3.特征标

因为表示是一维的,特征标与表示相同;又因为群SO_2的每一个元素自成一类(阿贝尔群的每一个元素自成一类),所以特征标

是

$$\chi \equiv T(\varphi) = e^{im\varphi} \tag{6}$$

它是参数 φ 的连续函数.

关于特征标的正交性定理(第三章 § 8(1)式)现在表示为积分形式

$$\int_0^{2\pi} \chi^{(m)}(\varphi)\chi^{(m')}(\varphi)\mathrm{d}\varphi = 2\pi\delta_{m'm} \tag{7}$$

若我们允许多值表示,则

$$\chi^{(m)}(\varphi) = e^{im\varphi/2}, \quad \chi^{(m)}(\varphi) = e^{im\varphi/3}$$

等等也可以当作 SO_2 的表示,因为很明显,

$$e^{im\varphi/k}e^{im\theta/k} = e^{im(\varphi+\theta)/k}$$

满足群的乘法规则,式中 k 是任一整数. 一般说,$\chi^{(m)}(\varphi) = e^{im\varphi/k}$是群 SO_2 的 k 值表示. 然而,真实物理体系的数学模型,只有单值表示和双值表示.

4. SO_2 的生成元

由于群 SO_2 是单参数群,故它只有一个生成元,这个生成元依赖于所考虑的同构于 SO_2 的群. 我们将举四个例子说明这点.

〔例 1〕所有复数$\{\exp(\mathrm{i}m\varphi)\}$($0\leqslant\varphi\leqslant 2\pi$, m 固定)的群. 此群与 SO_2 群同构,按 § 2(3)式,生成元由下式给出

$$I = \lim_{\varphi\to 0}\{\frac{1}{i\varphi}[\exp(\mathrm{i}m\varphi) - 1]\} = m \tag{8}$$

〔例 2〕所有行列式为 1 的二阶正交矩阵的群. 我们已经看到此群的一代表元可以写成

$$\begin{bmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi \\ -\sin\varphi & \cos\varphi \end{bmatrix}$$

于是,生成元为

$$I = \lim_{\varphi\to 0}[\frac{1}{i\varphi}\{\begin{bmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi \\ -\sin\varphi & \cos\varphi \end{bmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\}]$$

$$= \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \tag{10}$$

这是通常记作 σ_y 的一个矩阵.

任一行列式为 1 的 2×2 正交矩阵可以写作

$$\begin{bmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi \\ -\sin\varphi & \cos\varphi \end{bmatrix} = \exp(i\varphi\sigma_y) \tag{11}$$

事实上,把 $\exp(i\varphi\sigma_y)$ 展成形式上的指数级数,并利用泡里矩阵的性质 $\sigma_y^2=E$,即可验证上式.

〔例 3〕考虑一半径为 a 的圆,设 x 表示沿圆周的距离. 令 $f\equiv f(x)$. $T(\varphi)$ 代表把函数绕通过圆心并与圆平面垂直的轴转过 φ 角. 因为 f 只定义在圆周上,$T(\varphi)$ 的作用是使它移动一个距离 $a\varphi$(见图 4-1),即亦

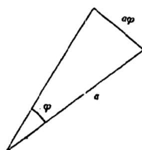


图 4-1

$$T(\varphi)f(x) = f(x + a\varphi)$$

于是,生成元 I 是这样一个算符,它对 $f(x)$ 的作用是

$$\begin{aligned} If(x) &= \lim_{\varphi\to 0}\left\{\frac{1}{i\varphi}[T(\varphi)f(x) - Ef(x)]\right\} \\ &= \lim_{\varphi\to 0}\left\{\frac{1}{i\varphi}[f(x + a\varphi) - f(x)]\right\} \\ &= -ia\frac{\partial f}{\partial x} \end{aligned} \tag{12}$$

可见,生成元是

$$I = -ia\frac{\partial}{\partial x} \tag{13}$$

注意到量子力学中的动量算符 $p_x=-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}$,则生成元可表为

$$I = ap_x/\hbar \tag{14}$$

由此可见,生成元与动量算符 p_x 成正比. 于是,根据 §2(6)式,群的一个算符可以写作

$$T(\varphi) = \exp(i\varphi ap_x/\hbar) \tag{15}$$

〔例 4〕令 $f\equiv f(x,y)$,而算符 $T(\varphi)$ 如(2)式那样代表坐标系的正交变换. 于是,$T(\varphi)$ 对 f 的作用是

$$T(\varphi)f(x,y)=f(x\cos\varphi+y\sin\varphi,\ -x\sin\varphi+y\cos\varphi) \quad (16)$$

这样，生成元可如下方法求得

$$\begin{aligned}If(x,y)&=\lim_{\varphi\to0}\frac{1}{i\varphi}[T(\varphi)f(x,y)-Ef(x,y)]\\&=\lim_{\varphi\to0}\frac{1}{i\varphi}[f(x\cos\varphi+y\sin\varphi-x\sin\varphi+y\cos\varphi)\\&\qquad-f(x,y)]\\&=\lim_{\varphi\to0}\{\frac{1}{i\varphi}[y\varphi\frac{\partial f}{\partial x}-x\varphi\frac{\partial f}{\partial y}\}\\&=-i(y\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial y})f(x,y)\end{aligned} \quad (17)$$

于是，生成元是 $$I=-i(y\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial y}) \quad (18)$$

注意到垂直于平面(x,y)的角动量分量算符 L_z 是

$$\begin{aligned}L_z&=i\hbar(y\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial y})\\&=xp_y-yp_x=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}\end{aligned}$$

则生成元可表为 $$I=-L_z/\hbar \quad (19)$$

即生成元与垂直于平面(x,y)的角动量分量算符 L_z 成正比. 于是，在二维平面(x,y)内，坐标的正交变换由下式给出：

$$T(\varphi)=\exp(-i\varphi L_z/\hbar) \quad (20)$$

§4 三维转动群 SO_3

1. 群 O_3 与群 SO_3

考虑三维实矢量空间（定义在实数域上的空间）上所有正交变换

$$\left.\begin{aligned}x_1'&=a_{11}x_1+a_{12}x_2+a_{13}x_3\\x_2'&=a_{21}x_1+a_{22}x_2+a_{23}x_3\\x_3'&=a_{31}x_1+a_{32}x_2+a_{33}x_3\end{aligned}\right\} \quad (1)$$

$$\sum_{i=1}^{3} a_{ij}a_{ik} = \delta_{jk}, \quad j,k = 1,2,3 \tag{2}$$

的集合,即保持空间中任两矢量的标积不变

$$\sum_i x'^2_i = \sum_i x_i^2 \tag{3}$$

的线性变换的集合,它们构成一个群,以 O_3 或 $O(3)$ 记之.我们又知道,所有 3×3 正交矩阵

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{21} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \tag{4}$$

$$\widetilde{A}A = A\widetilde{A} = E \tag{5}$$

也构成一个群,此群与群 O_3 同构.

若取上式两边的行列式值,并注意到

$$\det\widetilde{A} = \det A \tag{6}$$

我们得到
$$(\det A)^2 = 1$$

或
$$\det A = \pm 1 \tag{7}$$

于是,群 O_3 的矩阵分成两组,一组行列式为 $+1$,另一组行列式为 -1. 显然,行列式为 $+1$ 的诸矩阵包含有单位矩阵,而行列式为 -1 的矩阵不能包含单位矩阵. 因此,行列式为 -1 的矩阵本身不能构成一个群. 容易验证,行列式为 $+1$ 的诸矩阵构成一个群,记为 SO_3,即行列式为 $+1$ 的实正交矩阵群.

我们知道,空间转动变换保持空间任两矢量的标积不变,因而空间转动变换是实正交变换. 所有空间转动变换的集合组成一个群,称为三维转动群 SO_3,其行列式为 $+1$. 事实上,

(1)体系绕任意轴转动 $R(\alpha_1)$ 之后,继之又绕同一轴进行另一个转动 $R(\alpha_2)$,则总效果相当于体系的一个转动 $R(\alpha_3)$,记为 $R(\alpha_3) = R(\alpha_2)R(\alpha_1)$,这就是对乘法的封闭性;

(2)“零”转动或不转动(转动角为 0)就是恒等变换,即存在恒等元 $R(0)$;

(3)逆转动 $R^{-1}(\alpha)$ 是把转动 $R(\alpha)$ 复原的转动,它也属于体系的一个转动,即存在逆元;

(4)转动操作满足

$$[R(\alpha_1)R(\alpha_2)]R(\alpha_3) = R(\alpha_1)[R(\alpha_2)R(\alpha_3)]$$

即乘法满足结合律.

由以上四个性质可见,空间转动变换的集合构成一个群.

我们知道,空间反演变换的矩阵是单位矩阵的变号,即

$$I = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{8}$$

它的行列式为-1. I 自身不能构成一个群. 但反演和恒等变换 E 构成一个二阶阿贝尔群,记$\{E,I\}$,即第一章§2讨论的群 S_2. 注意到反演 I 是常数矩阵,它与所有 3×3 方矩阵对易,因而反演与所有转动对易. 于是,我们得到下述重要关系:

$$O_3 = SO_3 \otimes S_2 \tag{9}$$

即群 O_3 是群 SO_3 与群 S_2 的直积群. 因为群 S_2 只有两个一维不可约表示,于是,群 O_3 的表示很容易根据直积群理论(见第三章§15)由群 SO_3 的表示得出,因而下面我们将只考虑群 SO_3 的不可约表示.

根据(9)式,我们把群 O_3 称为三维转动·反演群.

2. 群 SO_3 的参数和一般元素

群 SO_3 的参数有很多种选法. 在三维空间中选一笛卡儿坐标系(x,y,z),可以用 $R_k(\psi)$代表绕 k 轴转动角为 ψ 的转动. k 的方向需要两个参数来确定,例如可选作 k 轴上一点的角极坐标(θ,φ). 群的三个参数为 θ,φ,ψ,如图 4-2 所示.

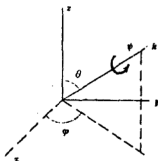


图 4-2

另一种方法是用欧拉(Euler)角表示旋转(图 4-3). 这种方法对进一步发展理论更为方便. 具有欧拉角(α,β,γ)的旋转记作 $R(\alpha,\beta,\gamma)$,它包含下述三个相继的旋转:(1)绕 z 轴转 α 角,(2)绕新

y 轴(即 y' 轴)转 β 角,(3)绕变换后的 z 轴(即 ζ 轴)转 γ 角,这时坐标轴 $0\text{-}xyz$ 转至坐标轴 $0\text{-}\xi\eta\zeta$. 空间转动可表为

$$R(\alpha,\beta,\gamma) = R_\zeta(\gamma)R_{y'}(\beta)R_z(\alpha) \tag{10}$$

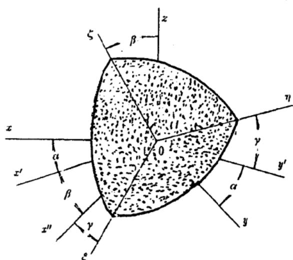


图 4-2

从图 4-3 可看出,如果把坐标轴 $0\text{-}\xi\eta\zeta$ 依次作转动 $R_z(-\alpha)$、$R_y(-\beta)$、$R_z(-\gamma)$,则坐标轴 $0\text{-}\xi\eta\zeta$ 就还原到 $0\text{-}xyz$. 可见这个转动就是 $R(\alpha,\beta,\gamma)$的逆转动

$$R^{-1}(\alpha,\beta,\gamma) = R_z(-\gamma)R_y(-\beta)R_z(-\alpha) \tag{11}$$

利用 $R^{-1}R=RR^{-1}=E$,便可得到

$$R(\alpha,\beta,\gamma) = R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(\gamma) \tag{12}$$

上式与(10)式等价,即空间转动可按两种不同的步骤实现. (12)式表示的转动是先绕 z 轴转 γ 角,再绕 y 轴转 β 角,最后绕 z 轴转 α 角. (12)式更便于应用,这是因为相继三个转动都是在同一坐标系中进行的.

为了求出 $R(\alpha,\beta,\gamma)$对应的变换矩阵,首先考虑 $R_z(\gamma)$,其变换矩阵为

$$R_z(\gamma) = \begin{pmatrix} \cos\gamma & -\sin\gamma & 0 \\ \sin\gamma & \cos\gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{13}$$

式中 $0 \leqslant \gamma \leqslant 2\pi$. 其次考虑 $R_y(\beta)$：

$$R_y(\beta) = \begin{pmatrix} \cos\beta & 0 & \sin\beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta \end{pmatrix} \tag{14}$$

式中 $0 \leqslant \beta \leqslant \pi$. 最后考虑 $R_z(\alpha)$：

$$R_z(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{15}$$

代入(12)式，得到

$$R(\alpha,\beta,\gamma) = \begin{pmatrix} \cos\alpha\cos\beta\cos\gamma - \sin\alpha\sin\gamma & -\cos\alpha\cos\beta\sin\gamma - \sin\alpha\cos\gamma & \cos\alpha\sin\gamma \\ \sin\alpha\cos\beta\cos\gamma + \cos\alpha\sin\gamma & -\sin\alpha\cos\beta\sin\gamma + \cos\alpha\cos\gamma & -\sin\alpha\sin\beta \\ -\sin\beta\cos\gamma & -\sin\beta\sin\gamma & \cos\beta \end{pmatrix} \tag{16}$$

这是一个行列式为＋1 的正交矩阵，它给出了矩阵群 SO_3 的一般元素.

至于三维转动・反演群 O_3，有四个参数，它们可取作 (α,β,γ,d)，其中 α,β,γ 是群 SO_3 的参数，而 d 是 O_3 元素的行列式，可取值 ± 1. 因此，群 O_3 的参数空间包含两个不连通的区域. 群 O_3 是一连续的紧致的李群，但它不连通.

3. 生成元和无穷小算符

群 SO_3 的生成元可由考虑绕 k 轴转 ε 角的无穷小旋转得到. 由旋转 $R_k(\varphi)$ $(0 \leqslant \varphi \leqslant 2\pi)$ 构成的群是 SO_3 群的一个子群，它同构于群 SO_2. 因此，由得出 § 3(19)式的方法可求得

$$I_k = -L_k/\hbar \tag{17}$$

式中 $L_k = \boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{k}^0$ 是角动量算符 $\boldsymbol{L}$ 沿 $\boldsymbol{k}$ 方向的分量，$\boldsymbol{k}^0$ 是沿 $\boldsymbol{k}$ 方向的单位矢量. 因为任意旋转都可由表示为笛卡儿坐标轴的三个旋转的乘积，因此需要三个算符：

$$I_x = -L_x/\hbar, \quad I_y = -L_y/\hbar, \quad I_z = -L_z/\hbar \tag{18}$$

于是，类似 § 3(20)式，任一旋转算符可以写作

$$R_k(\varphi) = \exp[-i\varphi(\mathbf{L}\cdot\mathbf{k}^0/\hbar)] \tag{19}$$

在展开指数函数时，应记住角动量算符的分量彼此不对易.

我们引进 3×3 实的反对称矩阵

$$I_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad I_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad I_z = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{20}$$

容易验证，上述矩阵遵从如下对易关系：

$$[I_x, I_y] = I_z, \quad [I_y, I_z] = I_x, \quad [I_z, I_x] = I_y \tag{21}$$

即 I_x, I_y, I_z 满足 § 2(7)式，可见它们是群 SO_3 的无穷小算符.

若令 $L = iI$，则有

$$[L_x, L_y] = iL_z, \quad [L_y, L_z] = iL_x, \quad [L_z, L_x] = iL_y \tag{22}$$

同样满足 § 2(7)式或 § 2(14)式，故它们也是群 SO_3 的无穷小算符.

群 SO_3 的唯一的卡塞米尔算符是 $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$，它与 L_x，L_y，L_z 都对易. 因为李群的卡塞米尔算符可以与无穷小算符同时对角化，故卡塞米尔算符的本征值可用以标志李群的不可约表示. 群 SO_3 的卡塞米尔算符 L^2 的本征值 $l(l+1)\hbar^2$（l 取非负整数值），因而群 SO_3 的不可约表示可由指标 l 标志.

4. **特征标**

众所周知，$2l+1$ 个球谐函数

$$Y_l^m(\theta,\varphi), \quad l = 0,1,2,\cdots, \quad -l \leqslant m \leqslant l$$

的集合，在坐标系旋转时变成它们自己的线性组合：

$$R(\alpha,\beta,\gamma)Y_l^m(\theta,\varphi) = \sum_{m'=-l}^{l} D_{m'm}^{(l)}(\alpha,\beta,\gamma)Y_l^{m'}(\theta,\varphi) \tag{23}$$

若 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ 在旋转下的变换性质已知，则可立即由 $2l+1$ 个函数 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ 生成不可约表示的矩阵，即生成 $(2l+1)$ 维的不可约表示. 此表示记作 $D^{(l)}$. 当 $l=0,1,2,\cdots$ 时，它们给出群 SO_3 的所有连续单值不可约表示. 我们将在 § 6 中讨论求矩阵 $D^{(l)}(\alpha,\beta,\gamma)$ 的一种方法.

象通常一样，求群 SO_3 不可约表示的特征标要比求具体的矩阵容易. 问题在于找寻一组适当的基函数，它们在群 SO_3 元素的作用下变成自己的线性组合. 现在我们指出一个由 $2l+1$ 个球谐函数 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ 生成不可约表示特征标的方法.

由第一章 § 4 可知，绕通过一定点的不同轴转过相同角度的操作属于同一共轭类的条件是当且仅当两轴线可通过群元素由其中之一轴线变到另一轴线. 群 SO_3 具有这种性质，因此，在群 SO_3 中，绕所有轴转过同一角度的旋转属于同一类. 所以，在任一表示中，群 SO_3 元素的特征标只依赖于转角的大小而与轴无关.

因此，无需知道在所有旋转下球谐函数的复杂的变换性质，只需选 z 轴为旋转轴，而 $R_z(\alpha)$ 对球谐函数 $Y_l^m(\theta,\varphi)$ 的作用是已知的：

$$
\begin{aligned}
R_z(\alpha)Y_l^m(\theta,\varphi) &= Y_l^m(\theta,\varphi-\alpha) \\
&= e^{-im\alpha}Y_l^m(\theta,\varphi)
\end{aligned}
\tag{24}
$$

这样，对基 $\{Y_l^m(\theta,\varphi)\}$ $(-l\leqslant m\leqslant l)$，$R_z(\alpha)$ 的矩阵表示是对角的，并可表为

$$
R_z(\alpha) = \begin{pmatrix}
e^{-il\alpha} & & & & 0 \\
 & e^{-i(l-1)\alpha} & & & \\
 & & \ddots & & \\
 & & & e^{i(l-1)\alpha} & \\
0 & & & & e^{il\alpha}
\end{pmatrix}
\tag{25}
$$

于是，容易求出 $R_z(\alpha)$ 的特征标

$$
\begin{aligned}
\chi^{(l)}(\alpha) &= \sum_{m=-l}^{l} e^{-im\alpha} \\
&= e^{-il\alpha}(1+e^{i\alpha}+e^{i2\alpha}+\cdots e^{i2l\alpha}) \\
&= \frac{\exp\{i(l+\frac{1}{2})\alpha\}-\exp\{-i(l+\frac{1}{2})\alpha\}}{\exp(i\alpha/2)-\exp(-i\alpha/2)} \\
&= \frac{\sin(l+\frac{1}{2})\alpha}{\sin\alpha/2}
\end{aligned}
\tag{26}
$$

5. 群 O_n 与群 SO_n

我们知道，所有 n 阶实正交矩阵的集合是一个群，记为 $O(n)$ 或 O_n. 这是一个连续的紧致的李群，但不连通. 实 n 维矢量空间中所有正交变换的集合也组成群 O_n. 群 O_n 变换保持二次型 $\sum_{i=1}^{n} x_i^2$ 不变. 群 O_n 的参数空间由两个不连通的叶组成，其一对应于行列式为 $+1$ 的矩阵(真转动)，而另一对应于行列式为 -1 的矩阵(反射). 由真转动构成的子群是一连通的$\frac{n(n-1)}{2}$个参数的李群(这是因为 n 阶正交矩阵包含 $n(n-1)/2$ 个独立的矩阵元素)，这个子群记为 $SO(n)$或 SO_n. 群 O_n 除群 SO_n 的 $n(n-1)/2$ 个连续参数外，还多一个分立的参数.

例如，群 O_4 是使二次型 $x^2+y^2+z^2+u^2$ 不变的全体正交变换群. 若把 x,y,z,u 看作是四维欧氏空间中的笛卡儿坐标轴，则可以认为群 SO_4 的六个参数代表六个坐标平面内的转动. 由群 SO_2 与群 SO_3 的理论可以推知(参阅 § 3(18)式和本节(18)式)，群 SO_4 的六个生成元可表为

$$\left.\begin{aligned}
A_1 &= -i\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\\
A_2 &= -i\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right)\\
A_3 &= -i\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\\
B_1 &= -i\left(x\frac{\partial}{\partial u} - u\frac{\partial}{\partial x}\right)\\
B_2 &= -i\left(y\frac{\partial}{\partial u} - u\frac{\partial}{\partial y}\right)\\
B_3 &= -i\left(z\frac{\partial}{\partial u} - u\frac{\partial}{\partial z}\right)
\end{aligned}\right\} \tag{27}$$

它们之间的对易子是

$$\left.\begin{aligned}
&[A_1,A_2] = iA_3, \quad [B_1,B_2] = iA_3\\
&[A_1,B_1] = 0, \quad [A_1,B_2] = iB_3, \quad [A_1,B_3] = -iB_2
\end{aligned}\right\} \tag{28}$$

其余对易子可由上面各式通过指标的循环置换得到.若引进

$$\left.\begin{aligned} J_l &= \frac{1}{2}(A_l + B_l) \\ K_l &= \frac{1}{2}(A_l - B_l) \end{aligned}\right\}, \quad l = 1,2,3 \tag{29}$$

则对易关系为

$$\left.\begin{aligned} &[J_1, J_2] = iJ_3, \quad [K_1, K_2] = iK_3 \\ &[J_l, K_j] = 0, \qquad l, j = 1,2,3 \end{aligned}\right\} \tag{30}$$

其余对易子由式中指标循环得到.这表明集合(J_1,J_2,J_3)和(K_1,K_2,K_3)都生成群 SO_3,故群 SO_4 同构于群 SO_3 与自身的直积.讨论氢原子的动力学对称性时要用到群 SO_4.

§5 特殊幺正群 SU_2

1.群 U_2 和群 SU_2

设 u 和 v 是二维复矢量空间中的一对矢量.此空间中的旋转把 u 和 v 变成它们的线性组合:

$$u' = au + bv, \quad v' = cu + dv \tag{1}$$

即

$$\begin{pmatrix} u' \\ v' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \tag{2}$$

式中 a,b,c,d 为复数,因而变换矩阵 $S=\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$包含 8 个参数.如果只考虑使二次型 $u^*u+v^*v=|u|^2+|v|^2$ 不变的旋转,则变换矩阵一定是幺正矩阵.换句话说,如要求$|u'|^2+|v'|^2=|u|^2+|v|^2$,则由幺正条件

$$S^+ S = 1 \tag{3}$$

可求得

$$\left.\begin{aligned} a^*a + c^*c &= 1 \\ b^*b + d^*d &= 1 \\ a^*b + c^*d &= 0 \\ ab^* + cd^* &= 0 \end{aligned}\right\} \tag{4}$$

这些条件使得变换矩阵中的参数由 8 个减为 4 个.由上式可以推

知，包含 4 个实参数的最一般的二阶幺正矩阵可表为①

$$\begin{pmatrix} \cos\theta e^{i\alpha} & \sin\theta e^{i\gamma} \\ -\sin\theta e^{i(\beta-\gamma)} & \cos\theta e^{i(\beta-\alpha)} \end{pmatrix}$$

此矩阵的行列式为 $\exp(i\beta)$，而 $\alpha,\beta,\gamma,\theta$ 是四个实参数.

所有这种变换的集合构成一个群，称为群 $U(2)$，它与所有二阶幺正矩阵群同构，是一个四参数的、连续的、连通的、紧致的李群.

群 $U(2)$ 含有所有行列式为 $+1$ 的二阶幺正群作为其子群，称为特殊幺正群或单模幺正群，记为 $SU(2)$ 或 SU_2，它在物理学中特别重要. 单模是指矩阵行列式为 $+1$，即

$$\det S = 1 \tag{6}$$

由上述条件可得

$$ad - bc = 1 \tag{7}$$

于是，变换矩阵 S 只剩下三个参数，故群 SU_2 是一个三参数的群. 由(4)式和(7)式可求得

$$c = -b^*, \quad d = a^*$$

这样便得到群 SU_2 的变换矩阵的最一般形式

$$S = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \tag{8}$$

其中

$$|a|^2 + |b|^2 = 1 \tag{9}$$

显然，条件(9)式使(8)式中的参数剩下三个. 以后我们用 $R(a,b)$ 记群 SU_2 的一般元素(8)式.

2. 群 SU_2 的不可约表示②

矩阵(8)式自身构成了群 SU_2 的一个表示. 其余的表示可以由考虑下列 $2j+1$ 个 u 和 v 的 $2j$ 次对称乘积的变换得出：

$$f_j^m = \frac{u^{j+m}v^{j-m}}{[(j+m)!(j-m)!]^{1/2}} \tag{10}$$

---

① 参阅 Joshi, Matrices and Tensors in Physics(1975)，式(5,50).

② 参阅 A. W. Joshi, Elements of Group Theory for Physicists(1977)，§ 4. 5.

其中 $m=-j,-j+1,\cdots,j-1,j$，而 j 是整数或半奇数. 因为 u 和 v 按(1)式变换成它们的线性组合；很明显，在 SU_2 的作用下，$2j+1$ 个函数(10)式也变成它们的线性组合. 这就提供了群 SU_2 的一个 $2j+1$ 维表示，其矩阵可将 $R(a,b)$ 作用于 f_j^m 并利用(2)式和(8)式得出：

$$R(a,b)f_j^m = \frac{1}{[(j+m)!(j-m)!]^{1/2}} \cdot (au+bv)^{j+m} \cdot (-b^*u+a^*v)^{j-m} \tag{11}$$

用二项式定理展开括号，我们得到

$$\begin{aligned} R(a,b)f_j^m &= \sum_{k,l} \frac{1}{[(j+m)!(j-m)!]^{1/2}} \\ &\quad \times \frac{(j+m)!}{k!(j+m-k)!}(au)^{j+m-k}(bv)^k \\ &\quad \times \frac{(j-m)!}{l!(j-m-l)!}(-b^*u)^{j-m-l}(a^*v)^l \\ &= \sum_{k,l} \frac{[(j+m)!(j-m)!]^{1/2}}{k!(j+m-k)!l!(j-m-l)!} \\ &\quad \times a^{j+m-k}(a^*)^l b^k(-b^*)^{j-m-l}u^{2j-k-l}v^{k+l} \end{aligned} \tag{12}$$

虽然 k 和 l 的求和上限分别是 $(j+m)$ 和 $(j-m)$，下限是零，但我们无须明显地标明，只要 k 和 l 取使分母中所有阶乘的宗量非负的全体整数值就能自动地顾及此点.

现在我们把(12)式右侧写成 $f_j^{m'}$ 的线性组合. 为此作变量变换 $m'=j-k-l$，则有 $2j-k-l=j+m'$，$k+l=j-m'$，并利用(10)式，则(12)式变成

$$R(a,b)f_j^m = \sum_{m'=-j}^{j} D^{(j)}_{m'm}(a,b)f_j^{m'} \tag{13}$$

其中

$$\begin{aligned} D^{(j)}_{m'm}(a,b) &= \sum_k \frac{[(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!]^{1/2}}{(j+m-k)!k!(j-m'-k)!(m'-m+k)!} \\ &\quad \times a^{j+m-k}(a^*)^{j-m'-k}b^k(-b^*)^{m'-m+k} \end{aligned} \tag{14}$$

这里，k 仍是取使分母中全部阶乘的宗量非负的一切可能的整数值（对固定的 j,m 和 m'）. 因而 k 的取值范围对不同的 m 和 m' 值可以不同. k 的下限由 $m-m'$ 值确定. 若 $m'-m<0$，则 k 的下限是 $m-m'$；而若 $m'-m\geqslant 0$，则 k 的下限是 0. 同样，k 的上限受制于两个因子：$j+m-k$ 和 $j-m'-k$，它等于两个整数 $j+m$ 和 $j-m'$ 中较小者.

(10)式定义的函数 f_j^m 很明显构成 $2j+1$ 维希尔伯特空间 L_{2j+1}（即(13)式中表示 $D^{(j)}$ 的空间）中一组 $2j+1$ 个独立基函数. 我们注意到

$$\sum_{m=-j}^{j}|f_j^m|^2=\sum_m\frac{|u^{j+m}v^{j-m}|^2}{(j+m)!(j-m)!}$$

$$=\frac{1}{(2j)!}(|u|^2+|v|^2)^{2j} \tag{15}$$

（这是因为前一式是后一式的二项式展开式）. 由于 $|u|^2+|v|^2$ 在 $SU(2)$ 的变换下是不变量，故 $\sum_m|f_j^m|^2$ 也是不变量，这表明表示 $D^{(j)}$ 是幺正的.

下面我们来证明，表示 $D^{(j)}$ 是不可约的. 我们将利用舒尔引理 1 的逆来证明. 换句话说，我们将证明，若矩阵 P 与所有 $D^{(j)}(a,b)$ 对易，则 P 必为常数矩阵. 为此，我们求出两种特殊情况下 $D^{(j)}$ 的矩阵. 首先选 $a=e^{i\alpha/2}$（α 是实数），$b=0$. 我们发现(14)式中只有 $k=0$ 的项不为零，这给出

$$D^{(j)}_{m'm}(e^{i\alpha/2},0)=\delta_{m'm}e^{im\alpha} \tag{16}$$

其次，如果我们在一般元素的表达式(12)中令 $m'=j$，又可发现 k 的唯一可能的值是 0，这给出

$$D^{(j)}_{jm}(a,b)=\left[\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}\right]^{1/2}a^{j+m}(-b^*)^{j-m} \tag{17}$$

现在，若 P 与(16)形式的所有矩阵 $D^{(j)}$ 对易，由于这些矩阵都是对角矩阵，对角元都不相等，则 P 一定也是一对角矩阵，即 $P_{ik}=P_i\delta_{ik}$. 考虑矩阵等式 $PD^{(j)}(a,b)=D^{(j)}(a,b)P$ 的 j 行 m 列元素，利用上式可求得 $P_jD^{(j)}_{jm}=D^{(j)}_{jm}P_m$. 由(17)式可知，$D^{(j)}_{jm}(a,b)$ 不恒等于零，从而得

到 $P_j=P_m$. 这就是说，P 必为一常数矩阵. 由此可见，$D^{(j)}$是一个不可约表示. 事实上，$D^{(j)}$是 SU_2 唯一的 $2j+1$ 维不可约表示. 此外，因为对不同的 j 值，表示 $D^{(j)}$的维数不同，故它们互不等价. 换言之，群 SU_2 对每一整数，有且仅有一个不等价不可约表示.

3. 表示 $D^{(j)}$的特征标

为求表示 $D^{(j)}$的特征标，首先来确定群 SU_2 的类结构. 我们将证明，群 SU_2 的元素(8)式中参数 a 的实数部分相同者属于同一类. 为此，首先计算群 SU_2 一般元素的本征值. 设 λ 是幺正矩阵(8)式的本征值，即

$$\begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \lambda\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \tag{18}$$

则由此方程并注意到(9)式可推出 λ 满足二次方程

$$\lambda^2 - (a + a^*)\lambda + 1 = 0 \tag{19}$$

由此得到两个本征值是

$$\left.\begin{aligned} \lambda_1 &= \frac{1}{2}[\beta + (\beta^2 - 4)^{1/2}] \\ \lambda_2 &= \frac{1}{2}[\beta - (\beta^2 - 4)^{1/2}] \end{aligned}\right\} \tag{20}$$

其中 $\beta=a+a^*$是实数. 如用 $R_e(a)$记 a 的实数部分，则由条件(9)式可知$-1\leqslant R_e(a)\leqslant 1$，故$-2\leqslant\beta\leqslant 2$. 于是，(20)式可改写为

$$\left.\begin{aligned} \lambda_1 &= \frac{1}{2}[\beta + i(4 - \beta^2)^{1/2}] \\ \lambda_2 &= \frac{1}{2}[\beta - i(4 - \beta^2)^{1/2}] \end{aligned}\right\} \tag{21}$$

由上式可看出

$$\left.\begin{aligned} \lambda_2 &= \lambda_1^* \\ \lambda_1\lambda_2 &= 1 \end{aligned}\right\} \tag{22}$$

于是有

$$|\lambda_1|^2 + |\lambda_2|^2 = 1 \tag{23}$$

我们可以取

$$\lambda_1 = e^{i\alpha/2}, \quad \lambda_2 = e^{-i\alpha/2} \tag{24}$$

式中 α 由下式定义

$$\cos\frac{\alpha}{2}=\frac{\beta}{2},\quad \sin\frac{\alpha}{2}=(1-\frac{\beta^2}{4})^{1/2} \tag{25}$$

因为$-2\leqslant\beta\leqslant 2$,我们有$-1\leqslant\cos\frac{\alpha}{2}\leqslant 1$ 和 $0\leqslant\sin\frac{\alpha}{2}\leqslant 1$,由此给出$0\leqslant\alpha\leqslant 2\pi$. 由于本征值只依赖$a$的实数部分,故$SU_2$的$R_e(a)$值相同的所有元素本征值将相同,从而相互共轭. 于是,在区间$(0,2\pi)$上的每一个实α值,将确定SU_2的一个共轭类.

现在我们来求不可约表示$D^{(j)}$中α所标志的共轭类的特征标. 因为同一类中所有元素的特征标相同,我们显然可以选取所考虑的SU_2中使$a=e^{i\frac{\alpha}{2}},b=0$的元素$R(a,b)$. 在$D^{(j)}$中此元素的矩阵为(16)式所示,它的迹便给出所考虑的元素的特征标. 于是

$$\begin{aligned}\chi^{(j)}(e^{i\frac{\alpha}{2}},0)&=\sum_{m=-j}^{j}D^{(j)}_{mm}(e^{i\frac{\alpha}{2}},0)\\&=\sum_{m=-j}^{j}e^{im\alpha}\\&=\frac{\sin(j+\frac{1}{2})\alpha}{\sin\frac{\alpha}{2}}\end{aligned} \tag{26}$$

这与转动群SO_3的特征标§4(26)式相似,其重要区别在于对群SU_2,j可取非负整数,也可取非负半奇数,而对群SO_3,l只能取非负整数.

4. SU_2表示的直积

求出SU_2群不可约表示的直积并把它们约化为不可约表示的线性组合是有意义的. 考虑SU_2的两个不可约表示的直积$D=D^{(j)}\otimes D^{(j')}$. 令$\chi$代表$D$的特殊标,它们是$D^{(j)}$和$D^{(j')}$相应特征标的乘积. 于是

$$\begin{aligned}\chi(\alpha)=\chi^{(j)}(\alpha)\chi^{(j')}(\alpha)&=\sum_{m=-j}^{j}e^{im\alpha}\sum_{m'=-j'}^{j'}e^{im'\alpha}\\&=\sum_{m=-j}^{j}\sum_{m'=-j'}^{j'}e^{i(m+m')\alpha}\end{aligned}$$

$$= \sum_{J=|j-j'|}^{j+j'} \sum_{M=-J}^{J} e^{iM\alpha}$$

$$= \sum_{J=|j-j'|}^{j+j'} \chi^{(J)}(\alpha) \tag{27}$$

这给出了一个关于两个不可约表示直积的非常简单的公式

$$D^{(j)} \otimes D^{(j')} = \sum_{J=|j-j'|}^{j+j'} D^{(J)} \tag{28}$$

它表明，每个不可约表示至多在直积表示的约化结果中出现一次；此外，只有值 J 满足三角形不等式 $|j-j'| \leqslant J \leqslant j+j'$ 的不可约表示 $D^{(J)}$ 包含在约化结果中. 等式(28)称为克莱布希-高登级数.

§6 群 SO_3 的不可约表示

在 §4 中讨论群 SO_3 的不可约表示时，实际上只求出了它们的特征标 §4(26)式，而没有得到 §4(23)式中的不可约表示的全部矩阵 $D^{(l)}(\alpha,\beta,\gamma)$. 现在我们可由 §5(14)式 $D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)$ 来求群 SO_3 的不可约表示 $D^{(l)}(\alpha,\beta,\gamma)$.

1. 群 SU_2 到群 SO_3 的同态

考虑函数 §5(10)式中 $j=1$ 的特殊情形，这时我们有三个函数：

$$\left.\begin{aligned} x_1 &\equiv f_1^1 = \frac{u^2}{\sqrt{2}} \\ x_2 &\equiv f_1^0 = uv \\ x_3 &\equiv f_1^{-1} = \frac{v^2}{\sqrt{2}} \end{aligned}\right\} \tag{1}$$

在群 SO_2 的一般元素 $R(a,b)$ 作用下它们作如下变换：

$$\left.\begin{aligned} x_1' &= R(a,b)x_1 = a^2x_1 + abx_2 + b^2x_3 \\ x_2' &= R(a,b)x_2 = -2ab^*x_1 + (aa^* - bb^*)x_2 + 2a^*bx_3 \\ x_3' &= R(a,b)x_3 = b^*x_1 - a^*b^*x_2 + a^{*2}x_3 \end{aligned}\right\} \tag{2}$$

现在定义三个新的变量：

$$x = x_1 - x_3, \quad y = -i(x_1 + x_3), \quad z = x_2 \tag{3}$$

它们的逆变换是

$$x_1 = (x + iy)/2, \quad x_2 = z, \quad x_3 = (-x + iy)/2 \tag{4}$$

带撇变量之间的关系亦如此定义. 这样,(2)式便变成

$$\left.\begin{aligned} x' &= \frac{1}{2}(a^2 + a^{*2} - b^2 - b^{*2})x \\ &\quad + \frac{i}{2}(a^2 - a^{*2} + b^2 - b^{*2})y + (ab + a^*b^*)z \\ y' &= -\frac{i}{2}(a^2 - a^{*2} - b^2 + b^{*2})x \\ &\quad + \frac{1}{2}(a^2 + a^{*2} + b^2 + b^{*2})y - i(ab - a^*b^*)z \\ z' &= -(a^*b + ab^*)x + i(a^*b - ab^*)y + (aa^* - bb^*)z \end{aligned}\right\} \tag{5}$$

注意到上式中所有系数都是实的,并注意§5(9)式,我们便可证明

$$x'^2 + y'^2 + z'^2 = x^2 + y^2 + z^2 \tag{6}$$

这样,我们就成功地把行列式为+1的二阶幺正矩阵与行列式为+1的三阶实正交矩阵联系起来. 后者对应于三维实矢量空间中的一个纯转动,因而是群 SO_3 的一个元素.

下面我们来证明逆命题,即群 SO_3 的所有转动与群 SU_2 中一个(或多个)元素相联系. 任一具有欧拉角 (α,β,γ) 的转动,可按§4(12)式表示为三个转动的乘积. 首先选 $a=e^{i\alpha/2}, b=0$ 的一个幺正变换,等式(5)给出

$$\left.\begin{aligned} x' &= x\cos\alpha - y\sin\alpha \\ y' &= x\sin\alpha + y\cos\alpha \\ z' &= z \end{aligned}\right\} \tag{7}$$

即群 SU_2 的元素 $R(e^{i\alpha/2},0)$ 对应于群 SO_3 中绕 z 轴转 α 角的旋转:

$$R(e^{i\alpha/2},0) = \begin{pmatrix} e^{i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha/2} \end{pmatrix} \to \begin{bmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{8}$$

同样,选 $a=\cos\dfrac{\beta}{2}, b=\sin\dfrac{\beta}{2}$,我们便有

$$R(\cos\frac{\beta}{2},\sin\frac{\beta}{2}) = \begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2} & \sin\frac{\beta}{2} \\ -\sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix}$$

$$\rightarrow \begin{pmatrix} \cos\beta & 0 & \sin\beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\beta & 0 & \cos\beta \end{pmatrix} \tag{9}$$

将(8)式和(9)式看作§4(12)式中的转动，我们便可看到幺正变换

$$\begin{pmatrix} e^{i\gamma/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\gamma/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2} & \sin\frac{\beta}{2} \\ -\sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha/2} \end{pmatrix}$$

对应于 SO_3 中的转动 $R(\alpha,\beta,\gamma)$：

$$\begin{pmatrix} \cos\frac{\beta}{2}e^{i(\alpha+\gamma)/2} & \sin\frac{\beta}{2}e^{-i(\gamma-\alpha)/2} \\ -\sin\frac{\beta}{2}e^{i(\alpha-\gamma)/2} & \cos\frac{\beta}{2}e^{-i(\alpha+\gamma)/2} \end{pmatrix} \rightarrow R(\alpha,\beta,\gamma) \tag{10}$$

现在我们必须来检验群 SO_3 与群 SU_2 间的这种对应是同态还是同构. 由(5)式我们已知 $SU(2)$ 的每一幺正矩阵对应于 SO_3 的唯一的转动. 我们要确定的是 SO_3 的每个转动有多少个 SU_2 中的矩阵与之对应. 由(10)式我们注意到两个转动 $R(0,0,0)$ 和 $R(0,2\pi,0)$ 在 SO_3 中都代表恒等元，但对应着两个幺正矩阵

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad -E = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

一般地，我们发现，在 SO_3 中代表同一元素的运算 $R(\alpha,\beta,\gamma)$ 和 $R(\alpha,\beta+2\pi,\gamma)$ 对应于 SU_2 中两个不同的矩阵(相差一个符号)，于是，存在着一个由 SU_2 到 SO_3 上的 2 对 1 的同态映射.

2. 由 SU_2 的表示得到 SO_3 的表示

我们已经知道群 SO_3 与群 SU_2 同态，便可以从群 SU_2 的一个表示出发得出群 SO_3 的一个表示，并从中选出对应于群 SO_3 的元素的矩阵. (10)式表明，SU_2 中参数为

$$a=\cos\frac{\beta}{2}e^{i(\alpha+\gamma)/2},\quad b=\sin\frac{\beta}{2}e^{i(\gamma-\alpha)/2}$$

的二阶幺正矩阵对应于 SO_3 的元素 $R(\alpha,\beta,\gamma)$. 因而可以这样得出群 SO_3 的一个表示:把代表群 SU_2 的元素 $R(a,b)$的矩阵 $D^{(j)}(a,b)$ 与群 SO_3 的元素 $R(\alpha,\beta,\gamma)$联系起来. 于是,所要求的矩阵为

$$\begin{aligned}
D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma) &\equiv D^{(j)}_{m'm}(\cos\frac{\beta}{2}e^{i(\alpha+\gamma)/2},\sin\frac{\beta}{2}e^{i(\gamma-\alpha)/2})\\
&=\sum_k(-1)^{m'-m+k}[(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!]^{1/2}\\
&\quad\times[(j+m-k)!(j-m'-k)!k!(m'-m+k)!]^{-1}\\
&\quad\times e^{i\alpha m}e^{im'\gamma}(\cos\frac{\beta}{2})^{2j+m-m'-2k}(\sin\frac{\beta}{2})^{m'-m+2k}
\end{aligned}\tag{11}$$

由(8)式我们注意到,SU_2 的元素$(e^{i\frac{\alpha}{2}},0)$对应于 SO_3 的元素 $R(\alpha,0,0)$. 因此,转动群 SO_3 的元素的特征标可以由特殊形式 § 5 (26)式($\beta=\gamma=0$)得到

$$\chi^{(j)}(\alpha)=\frac{\sin(j+\frac{1}{2})\alpha}{\sin\alpha/2}\tag{12}$$

3. 双值表示和双群

从(12)式我们看到,当 j 为整数时,这些特征标与 § 4(26)式表示的特征标 $\chi^{(l)}$一致. 换句话说,整数 j 的表示 $D^{(j)}$就是表示 $D^{(l)}$. 然而,j 为半奇数时,SO_3 的每个转动是两个矩阵$\pm D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)$的象,这是由于上面所提到的 2 到 1 的对应.

例如,恒等元是下面两个矩阵的象

$$\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}\quad 和\quad \begin{pmatrix}-1&0\\0&-1\end{pmatrix}$$

另一元素,例如说绕 y 轴转 π 角($\beta=\pi,\alpha=\gamma=0$),$R(0,\pi,0)$是 $\begin{pmatrix}0&-1\\1&0\end{pmatrix}$和$\begin{pmatrix}0&1\\-1&0\end{pmatrix}$的象,因为 $R(0,\pi,0)$与 $R(0,3\pi,0)$相同. 若以 C_2 代表 $R(0,\pi,0)$,选表示矩阵为

$$D(E)=\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}\quad 和\quad D(C_2)=\begin{pmatrix}0&-1\\1&0\end{pmatrix}$$

则得 $$D(E)D(C_2)=\begin{pmatrix}0&-1\\1&0\end{pmatrix}=D(C_2)D(E)=D(C_2)$$

但 $$D(C_2)D(C_2)=\begin{pmatrix}-1&0\\0&-1\end{pmatrix}=-D(C_2^2)=-D(E)$$

一般地，若 R 和 S 是 SO_3 的两个转动，j 为半奇数时，我们将有

$$D^{(j)}(R)D^{(j)}(S)=\pm D^{(j)}(RS) \tag{13}$$

这种表示叫做双值表示.

不难找到这种不确定的根源.考虑 SU_2 的两个元素 $R(a,b)$ 和 $R(-a,b)$，由矩阵元形式 § 5(14)式容易看出

$$D^{(j)}_{m'm}(-a,-b)=(-1)^{2j}D^{(j)}_{m'm}(a,b)$$

使得

$$D^{(j)}(-a,-b)=\begin{cases}D^{(j)}(a,b), & 当 j 为整数时\\ -D^{(j)}(a,b), & 当 j 为半奇数时\end{cases}$$

在 j 为整数的不可约表示中，元素 $R(a,b)$ 和 $R(-a,-b)$ 由同一矩阵表示，而当 j 为半奇数时，它们的矩阵相差一符号.特别是当 $j=\frac{1}{2}$ 时，我们得到的元素为

$$R(a,b)=\begin{pmatrix}a&b\\-b^*&a^*\end{pmatrix},\quad R(-a,-b)=\begin{pmatrix}-a&-b\\b^*&-a^*\end{pmatrix}$$

的矩阵群 SU_2.当我们考虑 SU_2 到 SO_3 的同态时，(13)式的符号是不确定的.因而我们可以得出结论：SU_2 的 j 为整数的表示 $D^{(j)}$ 是 SO_3 的单值表示 $D^{(j)}$，而 j 为半奇数的表示 $D^{(j)}$ 是 SO_3 的双值表示.

考虑一个元素个数为群 SO_3 的两倍的群，可以消除符号不确定的问题.在新群中，绕任意轴转 2π 角不同于恒等元，但转 4π 角是恒等元.这样，我们定义了一个新元素 $\bar{E}$，代表（譬如说绕 z 轴）转 2π 角.于是，我们所构造的群包含 SO_3 的所有转动加上 $\bar{E}$ 与群 SO_3 所有转动的乘积，显然应有：对 j 的半奇数值，$D^{(j)}$ 是新群的单值表示.此群叫做群 SO_3 的双群(double group)，记作 SO_3'.此群与

SU_2 同构，但 SO_3 不是它的子群. 事实上，SO_3 的元素现在不再构成一个群了，因为它们在乘法下已不再是封闭的了. 例如，考虑 SO_3 的元 C_n（代表绕轴转 $\frac{2\pi}{n}$ 角，n 为整数），其 n 次幂不等于恒等元，而等于上面定义的 $\bar{E}$，它不属于 SO_3，只是 $(C_n)^{2n}$ 才等于群 SO_3' 的恒等元.

应该指出的是，在物理学中，只要我们处理的是具有自旋的粒子或有自旋的粒子体系，这种情况就会发生. 例如，电子的轨道角动量是 $\hbar$ 的整数倍，而自旋角动量是 $\hbar/2$. 当我们处理含有奇数个电子的体系时，总角动量就是 $\hbar$ 的半奇数倍. 众所周知，在这种情况下，经过 2π 角转动后，体系的波函数不回到原来的值，而是改变一个符号；仅当转 4π 角时，它取原来的值. 用群论的语言说，这意味着波函数的对称性服从双群的不可约表示，而不服从原来的对称性群的表示.

§7 特殊幺正群 SU_3

SU_3 是所有行列式为 $+1$ 的 3 阶幺正矩阵群，它有 $3^2-1=8$ 个生成元，通常记作 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_8$. 虽然有很多种选法，但习惯上采用下述 8 个零迹矩阵当作 SU_3 的生成元：

$$\left.\begin{aligned}
&\lambda_1=\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&0\end{pmatrix},\quad \lambda_2=\begin{pmatrix}0&-i&0\\i&0&0\\0&0&0\end{pmatrix},\quad \lambda_3=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&-1&0\\0&0&0\end{pmatrix},\\
&\lambda_4=\begin{pmatrix}0&0&1\\0&0&0\\1&0&0\end{pmatrix},\quad \lambda_5=\begin{pmatrix}0&0&-i\\0&0&0\\i&0&0\end{pmatrix},\quad \lambda_6=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}\\
&\lambda_7=\begin{pmatrix}0&0&0\\0&0&-i\\0&i&0\end{pmatrix},\quad \lambda_8=\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&-2\end{pmatrix}
\end{aligned}\right\}\tag{1}$$

可以算出它们的对易子是

$$[\lambda_j, \lambda_k] = 2i\sum_l f_{jkl}\lambda_l \tag{2}$$

式中 f_{jkl}的非零分量是

$$\left.\begin{aligned} &f_{123} = 1 \\ &f_{147} = f_{516} = f_{246} = f_{257} = f_{345} = f_{637} = \frac{1}{2} \\ &f_{458} = f_{678} = \frac{\sqrt{3}}{2} \end{aligned}\right\} \tag{3}$$

以及它们的加以适当符号的置换. 这些结构常数是 SU_3 的固有性质,与在(1)式中选择的特殊表象无关.

由(1)式看到,λ_3 和 λ_8 是对角矩阵,因而相互对易. 我们可以验证,(1)式中的其他矩阵都不同时与 λ_3 和 λ_8 对易,故 SU_3 的秩是 2,因而群 SU_3 有两个卡塞米尔算符. 其一是生成元的二次组合:

$$C_1 = \sum_{i=1}^{8}\lambda_i^2 \tag{4}$$

不难验证,C_1 与所有生成元对易,即

$$[C_1, \lambda_i] = 0, \quad (i = 1,2,\cdots,8) \tag{5}$$

另一个卡塞米尔算符是生成元的很复杂的一个三线性组合.

群 SU_3 的两个卡塞米尔算符的本征值可由两个指标 p,q 标志,故 SU_3 的不可约表示可以用(p,q)记之,其中 p,q 取所有非负整数值. 可求出不可约表示(p,q)的维数为①

$$d = (1+p)(1+q)(2+p+q)/2 \tag{6}$$

只用维数代表不可约表示现已成为惯例,即不用(p,q)标志它,而根据 $p<q$ 还是 $p>q$,简单地用 d 或 d^* 标志,若 $p=q$,相应维数的表示只有一个,记为 d.

SU_3 的最低维的不可约表示是$(0,0)\equiv 1\ (p=0,q=0)$,其它一些不可约表示是$(0,1)\equiv 3$,$(1,0)\equiv 3^*$,$(0,2)\equiv 6$,$(2,0)\equiv 6^*$,(1,

① 例如参阅 Tonda and Ghirardi(1970),Symmetry Principles in Quantum Physics.

1)≡8,(0,3)≡10,等等,可以取这些不可约表示的直积并把它们约化成不可约表示的直和.在此不拟详述,只列出几个特例的分解:

$$3\otimes 3 = 6\oplus 3^*$$
$$3\otimes 3^* = 8\oplus 1$$
$$3\otimes 3\otimes 3 = 10\oplus 8\oplus 1 \tag{7}$$

2. SU_2 和 SU_3 的物理应用

由 § 4(23)式可知,单电子的轨道波函数(球谐振子)按群 SO_3 的不可约表示 $D^{(l)}$变换,或者说,单电子轨道波函数生成 SO_3 的不可约表示 $D^{(l)}$. 与此相似,单电子的自旋波函数应生成 SU_2 的表示.考虑具有自旋角动量 $\boldsymbol{S}=\frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}$ 的一个电子,其中 $\boldsymbol{\sigma}=(\sigma_x,\sigma_y,\sigma_z)$ 是泡里矩阵.两个正交归一的自旋波函数可记作 $\chi^{(\frac{1}{2})}$和 $\chi^{(-\frac{1}{2})}$,它们是 S^2 和 S_z 共同的本征函数.在坐标的正交变换下,这些自旋函数要经受由 $\chi^{(\frac{1}{2})}$和 $\chi^{(-\frac{1}{2})}$张成的二维希尔伯特空间中的一个幺正变换,这个空间称为旋量空间(spinor space),其中的任一矢量(两基矢的任一线性组合)都叫做一个旋量.于是,自旋函数 $\chi^{(\frac{1}{2})}$和 $\chi^{(-\frac{1}{2})}$生成 SU_2 的一个二维表示,即 $D^{(\frac{1}{2})}$.

现在考虑两个电子的情形.因为每个电子的自旋函数按 $D^{(\frac{1}{2})}$ 变换,体系的自旋函数将按 $D^{(\frac{1}{2})}\otimes D^{(\frac{1}{2})}$变换.这是群 SU_2 的一个 4 维表示.由群 SU_2 不可约表示直积的分解定律 § 5(28)式可知

$$D^{(\frac{1}{2})}\otimes D^{(\frac{1}{2})} = D^{(1)}\oplus D^{(0)} \tag{8}$$

若以 $\chi_1(+)$和 $\chi_1(-)$代表第一个电子的自旋函数,以 $\chi_2(+)$和 $\chi_2(-)$代表第二个电子的自旋函数,则直积表示(8)式的基矢显然是 $\{\chi_1(+)\chi_2(+),\chi_1(+)\chi_2(-),\chi_1(-)\chi_2(+),\chi_1(-)\chi_2(-)\}$. 利用标准方法,我们可以求出这些函数的四个对称化的线性组合,使其一生成表示 $D^{(0)}$,而其余三个生成表示 $D^{(1)}$. 归一化后,它们是

$$\left.\begin{aligned}
&D^{(0)}:\psi_{0,0}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\chi_1(+)\chi_2(-)-\chi_1(-)\chi_2(+)\right]\\
&D^{(1)}:\begin{cases}\psi_{1,1}=\chi_1(+)\chi_2(+)\\ \psi_{1,0}=\dfrac{1}{\sqrt{2}}\left[\chi_1(+)\chi_2(-)+\chi_1(-)\chi_2(+)\right]\\ \psi_{1,-1}=\chi_1(-)\chi_2(-)\end{cases}
\end{aligned}\right\}\quad(9)$$

在态 $\psi_{0,0}$ 中，体系的总自旋是零(单态)，而在 $\psi_{1,1}$，$\psi_{1,0}$，$\psi_{1,-1}$ 这三个态中，总自旋都是 $\hbar$(三重态).

群 SU_2 的另一重要应用是描述基本粒子的同位旋(isotopic spin). 在基本粒子表中，可以看到很多成对的粒子，性质实质上一样，只差电荷不同. 一个明显的例子是质子和中子，除电磁性质外，它们的全部性质几乎都一样. 我们可以把质子和中子当作单一核子场的两种状态，分别记为 $|p>$ 和 $|n>$. 定义一个算符 τ_3，使 $|p>$ 和 $|n>$ 分别是 τ_3 的本征值为 $\frac{1}{2}$ 和 $-\frac{1}{2}$ 的本征态：

$$\tau_3|p>=\frac{1}{2}|p>,\quad \tau_3|n>=-\frac{1}{2}|n> \tag{10}$$

态 $|p>$ 和 $|n>$ 张成一个二维希尔伯特空间，其中 τ_3 的表示与 σ_z 的表示相同. 与电子自旋问题类比，我们假定存在一个算符 $\boldsymbol{\tau}$，称为同位旋算符，由下式给出：

$$\boldsymbol{\tau}^2=\tau_1^2+\tau_2^2+\tau_3^2 \tag{11}$$

其中 τ_1，τ_2 和 τ_3 是矢量算符 $\boldsymbol{\tau}$ 的分量. 所有物理上可观测的态必须是 $\boldsymbol{\tau}^2$ 和 τ_3 的共同本征函数，于是，$|p>$ 和 $|n>$ 生成 SU_2 的二维不可约表示 $D^{(1/2)}$. 在任一本征态中，核子的电荷是

$$Q=\frac{1}{2}+\tau_3 \tag{12}$$

这种理论在数学上同电子自旋问题完全一样，正如我们不把自旋"向上"和自旋"向下"的电子当成两种粒子而把它们看作同一客体(电子)的两种不同状态，我们必须学会把质子和中子看作同一"核子"的不同状态. 因此，把同位旋算符看成角动量与把一个电子的轨道或自旋角动量算符看作角动量一样合理.

对基本粒子的研究表明，有某些粒子群，除了同位旋角动量外，还可以赋予更多的量子数，如重子数，奇异数，超荷等. 于是提出了这些粒子的对称性群可能比 SU_2 大，例如群 SU_3.

有一些粒子群，它们的态按群 SU_3 的不可约表示变换，它们对强相互作用是简并的，但电荷与奇异数不同. 按 SU_3 的不可约表示变换的基本三重态是 (p,n,Λ)，这里 Λ 是超子(hyperon). 现在已经清楚，有两群基本粒子(分别包含 8 个和 10 个粒子)，它们按 SU_3 的不可约表示 8 和 10 变换. 事实上，当 Gell-Mann 提出 SU_3 模型时①，他只知道有九个基本粒子可填到表示 10 的十个态中去，这样就有一个态空着. Gell-Mann 因而预言有某种性质的粒子存在，这种粒子很快在实验室被发现，并命名为 Ω^-粒子. 这件事与门列捷夫周期表的空白被后来新发现的元素所填满基本上类似.

§8 U_n 和 SU_n 的生成元

所有 n 阶幺正矩阵组成的群称为群 U_n，而所有行列式为 $+1$ 的 n 阶幺正群称为群 SU_n. 显然，SU_n 是 U_n 的子群. 因为一个 n 阶幺正矩阵有 n^2 个独立元素，故 U_n 是一个连续的、连通的、n^2 个参数的紧致李群. 群 SU_n 的元素还满足一个条件(行列式为 $+1$)，故群 SU_n 是一连续的、连通的、(n^2-1)个参数的紧致李群.

现在我们要求群 U_n 的 n^2 个生成元. 我们注意到，若 H 是厄密矩阵，则 e^{iH}是幺正矩阵；其逆亦真，即若 U 是幺正矩阵，则总可以写作

$$U = e^{iH} \tag{1}$$

其中 H 必是厄密矩阵. 注意所有 n 阶厄密矩阵的集合是 n^2 维实矢量空间，故厄密矩阵的实系数的线性组合仍是厄密矩阵，因而至多有 n^2 个独立的 n 阶厄密矩阵. 令 $H_1, H_2, \cdots, H_N$ 是 n^2 个独立的实参数，则任一 n 阶幺正矩阵可以写作：

---

① 参阅 Ne'eman and Gell-Mann(1964), The Eightfold Way.

$$U = \exp[i\sum_{j=1}^{N} a_j H_j] \tag{2}$$

可见，U_n 的所有元素，可由赋于(2)式右边 N 个实参数 a_j 各种可能值得到，故 N 个独立的厄密矩阵是 U_n 的生成元. 显然它们不是唯一的，它们的 N 个独立的线性组合同样可以作为 U_n 的生成元.

若 A 是任意方阵，则可以证明①

$$\det(e^A) = e^{\mathrm{trace}A} \tag{3}$$

将(3)式应用于(1)式，我们得到

$$\det U = \det(e^{iH}) = \exp(i\mathrm{tr}H) \tag{4}$$

因为厄米矩阵的所有对角元都是实的，故 trace$H \equiv \alpha$ 是实数. 这也附带证明了 $\det U = e^{i\alpha}$的模为 1.

至于群 SU_n，我们可以利用其元素的行列式为$+1$ 的条件. 若以 $U_0 = e^{iH_0}$代表 SU_n 的元素，则由条件 $\det U_0 = 1$ 得到

$$\mathrm{Tr}\,H_0 = 0 \tag{5}$$

注意迹为零的 n 阶厄密矩阵的集合是一个(n^2-1)维的实矢量空间，故至多有(n^2-1)个独立的 n 阶零迹厄密矩阵，它们可以选作群 SU_n 的对应(n^2-1)个独立实参数的生成元.

先选定 SU_n 的 n^2-1 个生成元，再加上 n 阶单位矩阵以得到 U_n 的 n^2 个生成元是方便的.

作为一个例子，SU_2 的三个生成元可以选作泡里自旋矩阵

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{6}$$

它们是一组 $2^2-1=3$ 个独立的二阶零迹厄密矩阵. 于是我们可以把$(E, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$选作 U_2 的生成元，其中 E 是二阶单位矩阵.

§9 洛 仑 兹 群

下面我们转而研究使二次型 $x_1^2+x_2^2+\cdots+x_p^2-x_{p+1}^2-\cdots-x_n^2$(0

① 参阅 Joshi(1975), Matices and Tensors in Physics, P. 133, 例 12. 12

$< p < n$)不变的变换群. 这类群被称为伪转动群(pseudo rotation group). 尽管有些作者也把所有这种群都称为洛仑兹(Lorentz)群,但习惯上洛仑兹群一词专指上述二次型中 $p=3, n=4$ 的情形,即专指保持 $x_1^2+x_2^2+x_3^2-x_4^2$ 不变的变换群. 洛仑兹群在狭义相对论中具有重要的意义. 在狭义相对论中,四维时空连续统(continum)由下述度规(metric)描述:

$$ds^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2 - c^2t^2 \tag{1}$$

伪转动群记作 $O_{p,n-p}$,可令 $p \geqslant n-p$ 而不失一般性. 最简单的伪转动群是 $p=1, n=2$ 的情形,即 $0_{1,1}$,它使二次型 x^2-y^2 不变. $0_{1,1}$的一个一般变换是

$$\left.\begin{aligned} x' &= x\cosh\theta + y\sinh\theta, \\ y' &= x\sinh\theta + y\cosh\theta \end{aligned}\right\} \tag{2}$$

其中 θ 是实数,$-\infty < \theta < +\infty$. 这样一个实参数 θ 可以表征该群的每一元素,而矩阵集合

$$\begin{pmatrix} \cosh\theta & \sinh\theta \\ \sinh\theta & \cosh\theta \end{pmatrix}, \quad -\infty < \theta < +\infty \tag{3}$$

则是此群的一个二维表示. 此外,$0_{1,1}$群还包含反射(如 $x \to -x, y \to y$),相应矩阵的行列式为 -1. 因此,$0_{1,1}$群是一个连续的单参数李群. 由于参数空间无界,它不是紧致的,又由于参数空间分成两个不相交的子空间,它是不连通的. 并且要注意,伪转动群的变换不是正交的.

仿照 §3 例 4,$0_{1,1}$唯一的生成元是

$$B = -i\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \tag{4}$$

若我们令 $y = iv$,使 $x^2-y^2 = x^2+v^2$,则保持 x^2-y^2 不变的变换也保持 x^2+v^2 不变. 但保持二次型 x^2+v^2 不变的群正好是群 SO_2,其变换为

$$x' = x\cos\theta + v\sin\theta \qquad v' = -x\sin\theta + v\cos\theta \tag{5}$$

若令 $\alpha = i\theta$,则(5)式化为(2)式,故可以把伪转动群看作是旋转虚角度的转动群,或者坐标之一是虚数的坐标轴的转动群.

现在来看二次型 $x^2+y^2-z^2$. 我们知道，在 xy 平面内的通常的旋转(5)式下，以及在 xz 平面内和 yz 平面内的洛仑兹旋转(2)下，$x^2+y^2-z^2$ 保持不变，因而，二次型 $x^2+y^2-z^2$ 的群 $0_{2,1}$是一个三参数连续非紧致的李群. 群的三个生成元可以选作

$$\left.\begin{aligned} B_1 &= -i\left(y\frac{\partial}{\partial z}+z\frac{\partial}{\partial y}\right) \\ B_2 &= -i\left(x\frac{\partial}{\partial z}+z\frac{\partial}{\partial x}\right) \\ A_3 &= -i\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right) \end{aligned}\right\} \tag{6}$$

它们之间的对易关系为

$$\left.\begin{aligned} [B_1,B_2] &= iA_3 \\ [B_2,A_3] &= -iB_1 \\ [B_1,A_3] &= -iB_2 \end{aligned}\right\} \tag{7}$$

上式后两个对易关系中的负号是 B_1,B_2 生成虚转动的缘故.

最后让我们考虑使二次型 $x^2+y^2+z^2-u^2$ 不变的群. 这个洛仑兹群显然包含三维空间(x,y,z)的实正交变换群 0_3 作为它的一个子群. 此外，它还包含 xu,yu 和 zu 平面内的虚转动. 因而它是一个六个参数的连续的非紧致李群，它的六个生成元可以选作 A_j 和 B_k $(j,k=1,2,3)$：

$$\left.\begin{aligned} A_1 &= -i\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right), \\ A_2 &= -i\left(z\frac{\partial}{\partial x}-x\frac{\partial}{\partial z}\right), \\ A_3 &= -i\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right), \\ B_1 &= -i\left(x\frac{\partial}{\partial u}+u\frac{\partial}{\partial x}\right) \\ B_2 &= -i\left(y\frac{\partial}{\partial u}+u\frac{\partial}{\partial y}\right) \\ B_3 &= -i\left(z\frac{\partial}{\partial u}+u\frac{\partial}{\partial z}\right) \end{aligned}\right\} \tag{8}$$

生成元之间的对易关系如下：

$$\left.\begin{aligned}
[A_1,A_2] &= iA_3 \\
[B_1,B_2] &= -iA_3 \\
[A_1,B_1] &= 0 \\
[A_1,B_2] &= iB_3 \\
[A_1,B_3] &= -iB_2
\end{aligned}\right\} \tag{9}$$

其它对易关系可由上式轮换指标得到. 注意 § 4(28)式与上式类似,只是其中第二等式相差一符号.

第二篇　高等量子力学

量子力学是描述微观粒子运动规律的理论，它是在本世纪 20 年代在总结大量实验事实和旧量子论的基础上建立起来的，并以崭新的物理思想和概念立足于物理学科之林.

1926 年薛定谔发表在 Annalen der Physik 的论文中建立了波动力学(wave mechanics)，几乎同时(1925 年)，海森堡发表在 physikalische Zeitschrift 的论文则建立了矩阵力学(matrix mechanics). 他们讨论的是同一课题，并且得到完全相同的结论，但是却从不同的物理假设出发，利用完全不同的数学方法，得出了量子力学的两种不同的形式：薛定谔的波动方程是偏微分方程，而海森堡的矩阵力学则是纯粹的代数运算. 值得注意的是，这两篇论文发表不过几个月之后，薛定谔就证明了量子力学的这两种形式是等价的. 狄喇克在 1930 年出版的《The Principle of Quantum Mechanics》一书中，给出了量子力学的更普遍的表述，而波动力学和矩阵力学只是它的特殊形式. 最后，量子力学的坚固的数学基础是由数学家诺伊曼在 1932 年完成的.

费曼的路径积分量子化是另一种不同于正则量子化的建立量子力学的方法，也就是说，路径积分方法是与波动力学方法和矩阵力学方法等价的量子力学的第三种描述方法. 在近代场论中，路径积分法是必不可少的工具.

半个多世纪以来，量子力学理论已深入到物理学的各个领域和化学以致生物学的某些领域，得到了极其广泛的应用. 与此同时，量子力学理论本身也不断发展，产生了对称性理论、二次量子化理论、形式散射理论、角动量理论以及相对论量子力学等. 量子力学已经成为现代物理学的理论基础和支柱.

高等量子力学与量子力学之间本来是没有什么明显的界限

的. 许多量子力学的名著和巨著无论从深度和广度上都几乎包含了量子力学的全部或大部分内容,没有初等量子力学与高等量子力学之分,因为两者的基本原理和出发点是一致的. 但是,由于高等学校物理专业教学计划的要求,形成了与大学本科水平相适应的量子力学课程的特定内容和深度,主要介绍量子力学的基本概念、基本原理和基本方法及其初步应用. 至于更深层次的内容只好留在研究生阶段进行学习,这就逐渐形成了所谓高等量子力学,或叫量子力学(Ⅱ). 1982 年教育部部属高等学校理论物理专业攻读硕士学位研究生培养方案设置了高等量子力学作为必修课程,并规定其内容提要如下:线性空间理论,有限群及其表示,量子力学的基本原理,表象理论和三种绘景,对称性和守恒定律,角动量理论,近似方法和若干应用,散射的形式理论,二次量子化方法,单电子的相对论量子力学.

作为高等量子力学的主要数学工具的矢量空间与群论基础,已在本书第一篇作了叙述. 作为高等量子力学导论,本篇将包含量子力学的基本原理,对称性,角动量,形式散射理论,相对论量子力学,二次量子化,路径积分量子化等内容. 至于辐射的量子理论、量子电动力学和量子场论,也是量子力学的发展和应用,但其物理思想和概念以及数学方法均有新的突破,已经形成另一门独立的学科,将在另一门课程中讨论,本书不予涉及. 一般来说,高等量子力学是量子力学的继续和深化,是学习量子场论的基础,也是进一步扩展量子力学应用的必备知识和工具.

第五章　量子力学的基本原理

§1　量子力学的基本公理

我们将根据狄喇克对量子力学的表述来陈述量子力学的基本原理. 虽然用一系列公理(axioms)来陈述量子力学的法则是方便的，但是我们并不支持数学家所期望的那种严格标准，而宁可遵照大部分物理学工作者觉得可接受的那种略为不严格的标准.

希尔伯特空间(Hilbert space)理论是量子力学的数学基础. 我们已经比较熟悉有限维的矢量空间，但是量子力学中所用到的空间大多数是无限维的. 因此，需要随时作出数学上的修正，以适应从有限维到无限维空间的过渡.

现在我们来陈述一些基本的物理公设.

1. 关于状态和状态迭加原理

公理 1　物理体系的微观状态 (microscopic state) 用希尔伯特空间中的矢量表征. 这一矢量称之为态矢量 (state vector)，记为 $|\Psi\rangle$. 希尔伯特空间有时又称为态矢量空间或态空间.

我们知道，希尔伯特空间是完备的内积线性矢量空间，在这空间中的任何两个态矢量的线性组合表示同一空间中的另一个态矢量：

$$|\Psi\rangle = c_1|\Psi_1\rangle + c_2|\Psi_2\rangle \tag{1}$$

其中 c_1, c_2 是任意复数. 其实，上式就是量子态迭加原理的数学表述，即体系的两个可能的量子态线性迭加后得到体系的另一个可能的量子态. 因此，公式(1)从数学上表述了态迭加原理. 注意到波动性的主要特征在于波的迭加性，所以，(1)式也是微观粒子波动

性的反映.

若$|\Psi\rangle$乘以任一复数c,得到

$$|\Psi'\rangle = c|\Psi\rangle \tag{2}$$

$|\Psi'\rangle$与$|\Psi\rangle$一样仍是描述同一个量子态.可见,量子态完全由希尔伯特空间中矢量的方向决定,而与矢量的长度无关.假使$|\Psi\rangle$还没有归一化,则可利用(2)式使$|\Psi\rangle$归一化.由此得出量子态的迭加与经典物理中波的迭加不同.在经典物理中,描述波动的函数ψ是具有确定意义的物理量(例如机械波的质点的位移、电磁波的电磁场强度E和H等),ψ和$c\psi$表示两种不同的波动状态;但量子力学中,$|\Psi\rangle$和$c|\Psi\rangle$表示同一量子态.$|\Psi\rangle$不是物理量,是希尔伯特空间的矢量.公理1只确定量子态由希尔伯特空间中的归一化矢量描写,没有确定由这个量子态如何测量出物理量,而它由下面的公理2来确定.

2.关于物理量

公理2 物理体系的动力学可观察量(例如位置,动量和能量等),由希尔伯特空间中具有完备本征矢量集的线性厄密算符表征.

由公理2知,厄密算符A的完备正交本征矢量集$\{|A_i\rangle\}$可以构成希尔伯特空间的一个基底,此空间中任意矢量$|\Psi\rangle$都可以用它来展开:

$$|\Psi\rangle = \sum_i c_i|A_i\rangle \tag{3}$$

其中$|A_i\rangle$满足

$$A|A_i\rangle = A_i|A_i\rangle \tag{4}$$

式中A是某一厄密算符.A_i是A的本征值,而$|A_i\rangle$是相应的本征矢.

若有任意可观察的物理量A,其对应的算符是A(用相同的符号),那么在$|\Psi\rangle$中测量此观察量得到什么结果呢?我们假定,在态$|\Psi\rangle$中测量可观察量A的结果只能是相应算符A的本征值之一,即A_i,其相应几率为$|c_i|^2$,其中c_i为展开式(3)式中的系数,即

$$c_i = \langle A_i | \Psi \rangle \tag{5}$$

我们称 c_i 为几率振幅(probability amplitude). 测量结果使状态 $|\Psi\rangle$ 发生改变,这时体系就处于 A 的本征矢 $|A_i\rangle$ 所表示的状态即 A 的本征态 $|A_i\rangle$ 中.

由此可见,在任意状态 $|\Psi\rangle$ 中测量可观察量时得到的不是确定的值,而是按确定几率分布的各种可能值. 因此,量子力学是关于微观体系运动的统计规律的理论.

在态 $|\Psi\rangle$ 中测量可观察量 A 得到的平均值(期望值 expectation value)是

$$\langle A \rangle = \frac{\langle \Psi | A | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \tag{6}$$

若 $|\Psi\rangle$ 是归一化的,则

$$\langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle \tag{7}$$

这是因为注意到(3)式、(4)式及正交归一化条件就有

$$\begin{aligned}
\langle \Psi | A | \Psi \rangle &= \sum_{i,j} \langle A_i | c_i^* A c_j | A_j \rangle \\
&= \sum_{i,j} c_i^* c_j \langle A_i | A | A_j \rangle \\
&= \sum_{i,j} c_i^* c_j A_j \langle A_i | A_j \rangle \\
&= \sum_{i,j} c_i^* c_j A_j \delta_{ij} \\
&= \sum_i c_i^* c_i A_i = \sum_i |c_i|^2 A_i \\
&= \langle A \rangle
\end{aligned}$$

若 $|\Psi\rangle = |A_i\rangle$,即体系处于可观察量 A 的本征态,这时测量 A 所得结果就是确定的本征值 A_i,并且测量不改变量子态,即测量结果体系仍处于原来的量子态 $|A_i\rangle$ 中,因此每次测量的结果都得到确定值 A_i. 这样,A 的平均值 $\langle A \rangle$ 也就是 A_i. 事实上,

$$\langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle = \langle A_i | A | A_i \rangle = A_i \langle A_i | A_i \rangle = A_i$$

3. 关于算符的对易关系(量子化条件)

如果我们没有构造相应于经典动力学变量的算符的方法的

话，公理 1 和 2 的内容将是无用的，在选择这些算符时有很大的自由，下述公理 3 却限制了这种选择的自由.

公理 3 对应于经典动力学变量 A 和 B 的算符，满足下列对易关系式：

$$[A,B] \equiv AB - BA = i\hbar\{A,B\}_q \tag{8}$$

其中 $\{A,B\}_q$ 称为量子泊松(Poisson)括号，是对应于经典泊松括号 $\{A,B\}_c$ 的算符. $\{A,B\}_c$ 的定义是

$$\{A,B\}_c = \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i}\frac{\partial B}{\partial q_i}\right) \tag{9}$$

其中 q_i 和 p_i 是该体系的经典正则坐标及其共轭动量.

当 A 和 B 是正则坐标和动量时，公理 3 就有最重要的应用. 由(9)式立刻得到 q_i 和 p_i 的经典泊松括号：

$$\left.\begin{aligned} \{q_i,q_j\}_c &= \{p_i,p_j\}_c = 0 \\ \{q_i,p_j\}_c &= \delta_{ij} \end{aligned}\right\} \tag{10}$$

将经典泊松括号过渡为量子泊松括号后，根据(8)式便可得到

$$\left.\begin{aligned} [q_i,q_j] &= [p_i,p_j] = 0 \\ [q_i,p_j] &= i\hbar\delta_{ij} \end{aligned}\right\} \tag{11}$$

其中 $\hbar=\dfrac{h}{2\pi}$，h 是普朗克(Planck)常数. 上式称为基本量子化条件，而公理 3 叫做量子化公理. 这个公理反映了微观世界某些物理量具有量子化的特点.

(8)式和(10)式只适用于有经典类比的物理量而不适用于没有经典类比的物理量(如自旋)，对于后者，其算符和对易关系必须另外考虑.

从以上公理可以推出非常重要的海森堡测不准关系(uncertainty relation). 我们知道，可观察量 A 和 B 在任意状态 $|\Psi\rangle$ 中的期望值分别为

$$\langle A\rangle = \langle\Psi|A|\Psi\rangle, \quad \langle B\rangle = \langle\Psi|B|\Psi\rangle$$

而

$$\bar{A} = A - \langle A\rangle, \quad \bar{B} = B - \langle B\rangle \tag{12}$$

是每次测量与平均值的偏差(deviation). 将此偏差的方均根值(root－mean－square deviation)定义为不确定性 ΔA 和 ΔB，即

$$\Delta A = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle^{1/2}, \quad \Delta B = \langle (B - \langle B \rangle^2 \rangle^{1/2} \tag{13}$$

或
$$\Delta A = \langle \overline{A}^2 \rangle^{1/2}, \quad \Delta B = \langle \overline{B}^2 \rangle^{1/2} \tag{14}$$

于是
$$\begin{aligned}
&(\Delta A)^2 \\
&= \langle \overline{A}^2 \rangle = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle \\
&= \langle \Psi | (A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2) | \Psi \rangle \\
&= \langle \Psi | A^2 | \Psi \rangle - 2\langle A \rangle \langle \Psi | A | \Psi \rangle + \langle A \rangle^2 \langle \Psi | \Psi \rangle \\
&= \langle A^2 \rangle - 2\langle A \rangle \langle A \rangle + \langle A \rangle^2 \\
&= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2
\end{aligned} \tag{15a}$$

同理
$$(\Delta B)^2 = \langle B^2 \rangle - \langle B \rangle^2 \tag{15b}$$

设
$$[A, B] = ic \tag{16}$$

其中 A 和 B 都是厄密的，即
$$A^+ = A, \quad B^+ = B \tag{17}$$

可以证明，$\overline{A}$ 和 $\overline{B}$ 也是厄密的，即
$$\overline{A}^+ = \overline{A}, \quad \overline{B}^+ = \overline{B} \tag{18}$$

也可以证明，
$$[\overline{A}, \overline{B}] = [A, B] = ic \tag{19}$$

于是我们有
$$\begin{aligned}
\langle \Psi | ic | \Psi \rangle &= \langle \Psi | (\overline{A}\,\overline{B} - \overline{B}\,\overline{A}) | \Psi \rangle \\
&= \langle \Psi | \overline{A}^+ \overline{B} | \Psi \rangle - \langle \Psi | \overline{B}^+ \overline{A} | \Psi \rangle \\
&= \langle \overline{A}\Psi | \overline{B}\Psi \rangle - \langle \overline{B}\Psi | \overline{A}\Psi \rangle \\
&= \langle \overline{A}\Psi | \overline{B}\Psi \rangle - \langle \overline{A}\Psi | \overline{B}\Psi \rangle^*
\end{aligned} \tag{20}$$

如令
$$\langle \overline{A}\Psi | \overline{B}\Psi \rangle = x + iy \tag{21}$$

则
$$\langle \overline{A}\Psi | \overline{B}\Psi \rangle^* = (x + iy)^* = x - iy \tag{22}$$

于是，(20)式变成
$$i\langle c \rangle = (x + iy) - (x - iy) = 2iy$$

故
$$y = \frac{1}{2}\langle c \rangle \tag{23}$$

注意到
$$x^2 + y^2 \geqslant y^2 \tag{24}$$

而
$$\begin{aligned}
x^2 + y^2 &= (x - iy)(x + iy) \\
&= \langle \overline{A}\Psi | \overline{B}\Psi \rangle^* \langle \overline{A}\Psi | \overline{B}\Psi \rangle \\
&= | \langle \overline{A}\Psi | \overline{B}\Psi \rangle |^2
\end{aligned} \tag{25}$$

将(23)、(25)两式代入(24)式得

$$|\langle \overline{A}\Psi|\overline{B}\Psi\rangle|^2 \geqslant (\frac{\langle c\rangle}{2})^2 \tag{26}$$

利用许瓦尔兹(Schwarz)不等式

$$|\langle \overline{A}\Psi|\overline{B}\Psi\rangle|^2 \leqslant \|\overline{A}\Psi\|^2 \cdot \|\overline{B}\Psi\|^2 \tag{27}$$

故得

$$\|\overline{A}\Psi\|^2 \cdot \|\overline{B}\Psi\|^2 \geqslant \frac{1}{4}\langle c\rangle^2 \tag{28}$$

但是

$$\begin{aligned}\|\overline{A}\Psi\|^2 &= \langle \overline{A}\Psi|\overline{A}\Psi\rangle = \langle \Psi|\overline{A}^+ \overline{A}|\Psi\rangle \\ &= \langle \Psi|\overline{A}\overline{A}|\Psi\rangle = \langle \overline{A}^2\rangle\end{aligned} \tag{29}$$

同理

$$\|\overline{B}\Psi\|^2 = \langle \overline{B}^2\rangle \tag{30}$$

将(29)、(30)两式代入(28)式得

$$\langle \overline{A}^2\rangle\langle \overline{B}^2\rangle \geqslant \frac{1}{4}\langle c\rangle^2 \tag{31}$$

注意到(14)式,最后得到

$$(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geqslant \frac{1}{4}\langle c\rangle^2 \tag{32}$$

这就是海森堡测不准关系.这个关系式是对两个量(与它们对应的算符不对易)的同时测量能得到的精确度的限制.

当 $A=x, B=p_x$,这时 $c=\hbar$,则得

$$(\Delta x)^2(\Delta p_x)^2 \geqslant \frac{\hbar^2}{4} \tag{33}$$

这就是坐标与动量的测不准关系.

在经典力学中所有量原则上都可以任意的精确度测量,与此相反,量子力学理论的特殊结构则限制着人们不能设计出违背测不准关系(如(33)式)的实验来.

4.关于状态随时间的演化

公理 4 微观体系的状态 $|\Psi(t)\rangle$ 随时间演化的规律服从薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = H|\Psi(t)\rangle \tag{34}$$

式中 H 是体系的哈密顿量(Hamiltonian)或哈密顿算符.

公理 4 规定了在给定外界环境下的微观体系的状态随时间演化的规律. 解薛定谔方程需要给定边界条件和初始条件. 根据薛定谔方程,在一定外界环境、一定边界条件下的微观体系,只要在某一时刻给定任意一个状态,那么这个体系在此后的所有时刻的状态就完全确定了.

我们来考虑,哈密顿量不显含时间 t 的情形,这时 $|\Psi(t)\rangle$ 可以分离变量,把时间因子分离出来. 设

$$|\Psi(t)\rangle = |\psi\rangle f(t) \tag{35}$$

代入薛定谔方程(34)式,得

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(|\psi\rangle f(t)) = H|\psi\rangle f(t)$$

即

$$|\psi\rangle i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f(t) = H|\psi\rangle f(t)$$

或

$$\frac{H|\psi\rangle}{|\psi\rangle} = \frac{i\hbar \frac{\partial f(t)}{\partial t}}{f(t)}$$

要使上式成立,必须满足下列关系

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{36}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f(t) = Ef(t) \tag{37}$$

式中 E 是分离变量常数,由(36)式看出,它的物理意义是哈密顿算符的本征值. 设 H 的本征值为 E_i,相应的本征矢量为 $|\psi_i\rangle$,则

$$H|\psi_i\rangle = E|\psi_i\rangle \tag{38}$$

由(37)式容易解出

$$f(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

当 H 的本征值为 E_i 时

$$f(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_i t} \tag{39}$$

代入(35)式得

$$|\Psi(t)\rangle = |\psi_i\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_i t}, \quad i = 1,2,\cdots \tag{40}$$

对于每一个 E_i,上式都是薛定谔方程的解,因此,解的最一般形式是所有这样的解的迭加

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_i |\psi_i\rangle c_i e^{-\frac{i}{\hbar}E_i t}, \quad i = 1,2,\cdots \tag{41}$$

式中 c_i 是迭加系数，由问题的起始条件决定. 例如 $t=0$ 时体系的瞬时状态设为 $|\psi_0\rangle$，则由上式得

$$|\psi_0\rangle = \sum_i c_i |\psi_i\rangle \tag{42}$$

由此可求得

$$c_i = \langle\psi_i|\psi_0\rangle \tag{43}$$

于是得到问题的解为

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|\psi_0\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_i t}, \quad i = 1,2,\cdots \tag{44}$$

上式明显地看出，只要知道 $t=0$ 的初态 $|\psi_0\rangle$，以后任一时刻的态 $|\Psi(t)\rangle$ 就完全确定了.

若初态为 H 的某一本征矢 $|\psi_k\rangle$ 所描写，即 $|\psi_0\rangle = |\psi_k\rangle$，这时由 (43) 式得

$$\begin{cases} c_k = 1 \\ c_j = 0, \quad \text{当 } j \neq k \end{cases}$$

于是，(44) 式成为

$$|\Psi(t)\rangle = |\psi_k\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t} \tag{45}$$

上式表示的状态称为定态. 在初等量子力学中已经知道，在定态中，一切物理量取不同值的几率(因而它们的平均值)都不随时间而变化. 但是定态是一个特殊的含时状态，描写体系的一种运动，定态并不就是 $|\psi_k\rangle$，而是 $|\psi_k\rangle$ 乘以特殊的时间因子 $e^{-\frac{i}{\hbar}E_k t}$. 最后还要注意，并不是 H 不显含 t 时薛定谔方程的解全部是定态，而是有些定态解，也有非定态解. 定态解 (40) 式的线性迭加得到的解 (41) 式一般是非定态解.

以上陈述的基本公理是量子力学的基本框架，在这些公理的基础上建立了量子力学的理论体系. 诚然，公理是不能推导出来的，其正确性靠理论结果与实验事实对比来检验. 量子力学的理论的正确性已为微观世界各个领域中越来越多的事实所证明.

§2 幺正变换

我们已经知道，物理体系的状态和可观察量，分别由希尔伯特空间的矢量和算符来描述. 从表象理论又知道，态矢量和算符在不同的表象中具有不同的表达形式，而各种表象之间可以通过一定的变换联系起来，这些变换具有幺正性质. 往后我们将会看到，幺正变换不仅把不同的表象联系起来，而且还有更广泛的意义. 现在我们来讨论幺正变换及其性质.

1. 幺正算符的定义

若一个线性算符 U 的厄密共轭算符(伴算符)U^+等于其逆算符 U^{-1}，即

$$U^+ = U^{-1} \tag{1}$$

则称 U 是幺正算符.

从定义看出，U 必须有逆存在，而且它的逆 U^{-1}应等于 U^+. 若用 U 左乘(1)式得 $UU^+=1$，再用 U 右乘(1)式得 $U^+U=1$，因此，幺正算符的定义也可以改写成等价的表示式：

$$\left.\begin{aligned} U^+U &= 1 \\ UU^+ &= 1 \end{aligned}\right\} \tag{2}$$

在有限维空间中，$U^+U=1$ 就包含着 $UU^+=1$. 因此，在有限维空间中，满足 $U^+U=1$ 时 U 就是幺正的. 但在无限维空间中，则需同时满足(2)式中两个条件时，U 才是幺正的. 只满足(2)式中第一式称为左等距算符，满足(2)式中第二式的为右等距算符.

容易证明，幺正算符 U 的逆 U^{-1}也是幺正的. 事实上，

$$(U^{-1})^+ = (U^+)^+ = U = (U^{-1})^{-1} \tag{3}$$

同时，两个幺正算符 U 和 V 的乘积，仍是幺正算符. 证明如下：

$$(UV)^+ = V^+U^+ = V^{-1}U^{-1} = (UV)^{-1} \tag{4}$$

2. 幺正变换引起的态矢量和算符的变换

如果我们对某一物理体系进行幺正变换 U(例如对体系施以旋转)，则描述体系的态矢量作如下变换：

$$|\psi'\rangle = U|\psi\rangle \tag{5}$$

若体系处于某力学量 A 的本征态 $|u_n\rangle$，则有

$$|u'\rangle = U|u_n\rangle, \quad 或 \ |u_n\rangle = U^{-1}|U'_n\rangle \tag{6}$$

在未变换前(设力学量 A 的分立谱没有简并)

$$A|u_n\rangle = \lambda_n|u_n\rangle \tag{7}$$

则在未变换前对体系测量力学量 A 必得到本征值 λ_n. 如果将测量仪器也同样施以变换(旋转)，则测量仪器与体系的相对位置没有变化，在新的位置上，测量仪器仍给出同样的结果 λ_n. 因为变换后处于 $|u'_n\rangle$，仪器测量的是 A'，故有

$$A'|u'_n\rangle = \lambda_n|u'_n\rangle \tag{8}$$

注意到(6)，(7)和(8)式，我们有

$$\begin{aligned} A'|u'_n\rangle &= \lambda_n|u'_n\rangle = \lambda_n U|u_n\rangle \\ &= U\lambda_n|u_n\rangle = UA|u_n\rangle \\ &= UAU^{-1}|u'_n\rangle \end{aligned}$$

故得

$$A' = UAU^{-1} \tag{9}$$

因为 $U^{+}=U^{-1}$，上式又可表为

$$A' = UAU^{+} \tag{10}$$

可见，当对物理体系施以幺正变换时，态按(6)式变换，而力学量(算符)则按(9)式或(10)式变换. 事实上，(9)式是相似变换，故算符 A 通过幺正的相似变换变为 A'，A' 称为变换后的算符.

3. **幺正变换的性质**

(1) 幺正变换不改变两矢量的内积.

$$(\varphi',\psi') = (U\varphi,U\psi) = (\varphi,U^{+}U\psi) = (\varphi,\psi) \tag{11}$$

(2) 幺正变换不改变矢量的模.

$$(\psi',\psi') = (U\psi,U\psi) = (\psi,U^{+}U\psi) = (\psi,\psi) \tag{12}$$

注意到

$$\|\psi\|^2 = (\psi,\psi)$$

(12)式可写成

$$\|\psi'\|^2 = \|\psi\|^2 \tag{13}$$

即

$$\|\psi'\| = \|\psi\| \tag{14}$$

(3) 幺正变换不改变算符的本征值.

设
$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \tag{15a}$$
则有
$$\begin{aligned} A'|\psi'\rangle &= UAU^{-1}U|\psi\rangle \\ &= UA|\psi\rangle \\ &= U\lambda|\psi\rangle \\ &= \lambda|\psi'\rangle \end{aligned} \tag{15b}$$

(4)幺正变换不改变算符的平均值.
$$\begin{aligned} \langle\psi'|A'|\psi'\rangle &= \langle\psi|U^+ UAU^{-1}U|\psi\rangle \\ &= \langle\psi|A|\psi\rangle \end{aligned} \tag{16}$$

(5)幺正变换不改变算符的矩阵元.
$$\begin{aligned} \langle\varphi'|A'|\psi'\rangle &= \langle U\varphi|UAU^{-1}|U\psi\rangle \\ &= \langle\varphi|U^+ UAU^{-1}U|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle \end{aligned} \tag{17}$$

(6)幺正变换不改变算符的厄密性.

设 A 是厄密算符,即
$$A^+ = A \tag{18a}$$
则有
$$\begin{aligned} (A')^+ &= (UAU^{-1})^+ \\ &= (U^{-1})^+ A^+ U^+ \\ &= (U^{-1})^+ AU^+ \end{aligned}$$
如果 U 不是幺正算符,则 A' 不一定是厄密算符,如果 U 是幺正算符,则上式变成
$$\begin{aligned} (A')^+ &= (U^+)^+ AU^{-1} \\ &= UAU^{-1} \\ &= A' \end{aligned} \tag{18b}$$
可见 A' 也是厄密算符,即幺正变换保持 A 的厄密性不变.

(7)幺正变换不改变算符的幺正性.

设 V 是幺正算符,即
$$V^+ = V^{-1} \tag{19a}$$
则有
$$\begin{aligned} (V')^{-1} &= (UVU^{-1})^{-1} = (U^{-1})^{-1}V^{-1}U^{-1} \\ &= UV^{-1}U^{-1} = UV^+ U^{-1} = (U^+)^+ V^+ U^{-1} \\ &= (U^{-1})^+ V^+ U^+ = (UVU^{-1})^+ \end{aligned}$$

$$=(V')^{+} \tag{19b}$$

(8)幺正变换不改变算符间的代数关系．特别地，幺正变换不改变基本量子化条件．基本量子化条件已由§1(11)式给出，即

$$[q_i,q_j]=[p_i,p_j]=0, \qquad [q_i,p_j]=i\hbar\delta_{ij}$$

我们以其中

$$qp-pq=i\hbar \tag{20a}$$

为例，进行幺正变换，得

$$\begin{aligned}q'p'-p'q' &=(UqU^{-1})(UpU^{-1})-(UpU^{-1})(UqU^{-1})\\ &=UqpU^{-1}-UpqU^{-1}\\ &=U(qp-qp)U^{-1}\\ &=Ui\hbar U^{-1}\\ &=i\hbar\end{aligned} \tag{20b}$$

以上我们看到，幺正变换对量子力学的基本结果不会有任何改变，即幺正变换不改变物理规律和测量结果．所以，由幺正变换联系起来的态矢量或算符是完全等价的．

§3 运动方程的三种绘景

在量子力学中，描写微观体系的状态及其运动规律，有三种彼此等价的方式，称为运动方程的三种绘景，即 Schrödinger Picture, Heisenberg Picture and Interaction Picture(相互作用绘景)．§1中公理4的运动方程(34)式就是薛定谔绘景中的描述方式．这三种绘景之间，由幺正变换联系，即通过适当的幺正变换可以从一种绘景过渡到另一种绘景．

1.薛定谔绘景

薛定谔绘景是把体系物理性质(如可观察量A的平均值$\langle A\rangle(t)$)随时间变化的原因归结为态矢量$|\Psi(t)\rangle$是时间的函数，而力学量算符则与时间无关(除少数例外，例如含时微扰)．

(1) 薛定谔方程

在这种描述方式中，体系的态矢量$|\Psi(t)\rangle$必须满足薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = H|\Psi(t)\rangle \tag{1}$$

$|\Psi(t)\rangle$是一个在希尔伯特空间中运动的矢量．当初态给定时，即已知$|\Psi(t_0)\rangle$时，根据(1)式即可求出任意时刻的$|\Psi(t)\rangle$．

(2) 时间演化算符

在薛定谔绘景中，我们也可以引进一种称为时间演化算符(time-development operator or evolution operator)的幺正算符$U(t,t_0)$，把$|\Psi(t)\rangle$与$|\Psi(t_0)\rangle$联系起来，从而得出一种与(1)式等价的描述．时间演化算符$U(t,t_0)$的定义如下：

$$|\Psi(t)\rangle = U(t,t_0)|\Psi(t_0)\rangle \tag{2}$$

由定义可知，只要知道了算符$U(t,t_0)$的形式，即可由$|\Psi(t_0)\rangle$求出$|\Psi(t)\rangle$．显然，算符$U(t,t_0)$只能通过薛定谔方程(1)式求出．为此，将(2)式代入(1)式得

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0)|\Psi(t_0)\rangle = HU(t,t_0)|\Psi(t_0)\rangle$$

上式对于同一体系的一切$|\Psi(t_0)\rangle$成立，所以，得到$U(t,t_0)$所满足的算符方程：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0)\rangle = HU(t,t_0) \tag{3}$$

当体系的哈密顿量不显含t时，由上式可得到演化算符的明显形式：

$$\left.\begin{aligned} U(t,t_0) &= e^{-\frac{i}{\hbar}(t,t_0)H} \\ U(t,t_0) &= 1 \end{aligned}\right\} \tag{4}$$

上式中第二式为初始条件，第一式已满足初始条件．

如果哈密顿量显含时间，(4)式不能成立，这时(3)式可化为积分方程(integral equation)．为此，将(3)式两边积分，得

$$U(t,t_0) = 1 + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} H(t')U(t',t_0)dt' \tag{5}$$

其中利用了初始条件来确定积分常数．上式是一个积分方程，可用迭代法求解，得到无穷级数的形式解．

(3)时间演化算符的性质

时间演化算符具有如下一些性质：

$$U(t_0,t_0)=1 \tag{6}$$

$$U(t,t_1)U(t_1,t_0)=U(t,t_0) \tag{7}$$

$$U(t,t_0)=U^{-1}(t_0,t) \tag{8}$$

$$U^{+}(t,t_0)=U^{-1}(t,t_0) \tag{9}$$

由初始条件 $t=t_0$ 时 $|\Psi(t)\rangle=|\Psi(t_0)\rangle$ 立刻得到(6)式. (7)式称为时间演化算符 U 的群性质，证明如下. 利用(2)式有

$$|\Psi(t_1)\rangle=U(t_1,t_0)|\Psi(t_0)\rangle$$

$$|\Psi(t)\rangle=U(t,t_1)|\Psi(t_1)\rangle$$

$$=U(t,t_1)U(t_1,t_0)|\Psi(t_0)\rangle$$

上式对比(2)式便得到(7)式.

令(7)式中 $t=t_0$，并利用(6)式得

$$U(t_0,t_1)U(t_1,t_0)=U(t_0,t_0)=1$$

由此得 $$U(t_1,t_0)=U^{-1}(t_0,t_1)$$

由于 t_1 是任意的，故有

$$U(t,t_0)=U^{-1}(t_0,t)$$

这就证明了(8)式成立. 下面证明 $U(t,t_0)$ 的幺正性即(9)式.

由几率守恒，要求

$$\langle\Psi(t_0)|\Psi(t_0)\rangle=\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle$$

$$=\langle\Psi(t_0)|U^{+}(t,t_0)U(t,t_0)|\Psi(t_0)\rangle$$

于是得到 $$U^{+}(t,t_0)U(t_0,t)=1 \tag{10}$$

因为 U 是无限维希尔伯特空间中的算符，所以还不能说 $U(t,t_0)$ 是幺正算符，只能说是左等距算符. 用 $U^{+}(t,t_0)$ 左乘(8)式两边，得

$$U^{+}(t,t_0)U(t,t_0)=U^{+}(t,t_0)U^{-1}(t_0,t)$$

利用(10) 式得 $$U^{+}(t,t_0)U^{-1}(t_0,t)=1$$

用 $U(t,t_0)$ 右乘上式两边，得

$$U^{+}(t,t_0)=U(t_0,t)$$

取(8) 式的逆： $$U^{-1}(t,t_0)=U(t_0,t)$$

由此两式得 $$U^{+}(t,t_0)=U^{-1}(t,t_0)$$

这就证明了(9)式.

(4) 平均值随时间的变化

最后，我们来讨论可观察量 A 的平均值 $\langle A\rangle$ 随时间变化的情形. 由于态矢量 $|\Psi(t)\rangle$ 随时间演化，即使不显含时间的算符 A，其平均值 $\langle A\rangle(t)$ 一般仍可能与时间有关：

$$\langle A\rangle(t) = \langle\Psi(t)|A|\Psi(t)\rangle \tag{11}$$

利用薛定谔方程可求得 $\langle A\rangle(t)$ 随时间变化的规律. 注意到

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\langle A\rangle(t)}{\mathrm{d}t} &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\Psi(t)|A|\Psi(t)\rangle \\ &= \left[\frac{\partial}{\partial t}\langle\Psi(t)|\right]A|\Psi(t)\rangle + \langle\Psi(t)| \\ &\quad \frac{\partial A}{\partial t}|\Psi(t)\rangle + \langle\Psi(t)|A\left[\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle\right]\end{aligned} \tag{12}$$

将薛定谔方程(1)式及其共轭方程

$$\begin{aligned}-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle\Psi(t)| &= \langle\Psi(t)|H^+ \\ &= \langle\Psi(t)|H\end{aligned}$$

代入(12)式，得

$$\frac{\mathrm{d}\langle A\rangle(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{i}{\hbar}\langle[H,A]\rangle + \langle\frac{\partial A}{\partial t}\rangle \tag{13}$$

若算符 A 不显含时间，则 $\frac{\partial A}{\partial t}=0$，于是 $\langle\frac{\partial A}{\partial t}\rangle=0$，便得到

$$\frac{\mathrm{d}\langle A\rangle(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{i}{\hbar}\langle[H,A]\rangle \tag{14}$$

如果算符 A 与体系的哈密顿量对易

$$[H,A] = 0 \tag{15}$$

那么就有

$$\frac{\mathrm{d}\langle A\rangle(t)}{\mathrm{d}t} = 0 \tag{16}$$

上式表明算符 A 对任意态的平均值不随时间而变化，我们就说可观察量 A 是守恒量，或运动恒量(constant of motion). 由(15)式和(16)式可知，在算符 A 不显含时间的情况下，只要算符 A 与体系的哈密顿量对易，可观察量 A 就是守恒量.

(5) 几点说明

①综上所述，薛定谔绘景的特征是：态矢量随时间变化由薛定谔方程描写，表示可观察量的算符一般不显含时间，这些不显含时间的算符的本征矢量构成希尔伯特空间不动基矢，这些基矢并不描写物理状态，描写物理状态的矢量必定是显含时间的，因为它们必须满足含时的薛定谔方程. 当 H 不显含时间时，薛定谔方程有很多定态解，这些定态解是 H 的本征矢量乘以一个时间因子，例如：

$$|\Psi(t)\rangle = |\Psi_n\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

它所描写的状态称为定态. 由于时间因子的复平方为 1，在很多情况下不起作用，因此往往略而不写这个时间因子. 但是我们应当记住，凡是描写物理状态的矢量，都是显含时间的，定态亦是如此. 我们可以直观地把这些显含时间的矢量看作是在希尔伯特空间中不断改变方向的动矢量，定态也是动矢量.

②在薛定谔绘景，除了直接矢量表示之外，还可以有各种表象(representation)，例如坐标表象、动量表象、能量表象等. 每种表象由一套算符完备集确定一组共同本征矢量作基矢. 态矢量的矩阵表示是一个一列矩阵，矩阵元是态矢量在各基矢上的分量，而算符则是方矩阵. 当基矢属于连续本征值时，状态可以用波函数表示，而算符则可表为相乘或微分算符. 例如坐标表象中，状态用波函数 $\Psi(x,t)$ 表示，坐标算符 x 对 $\Psi(x,t)$ 的作用就是相乘，而动量算符 p_x 则是微分算符 $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$. 值得注意，不论什么表象，描写状态的一列矩阵或波函数，总是显含时间的，而描写物理量的矩阵或微分算符则通常是不含时间的.

③在初等量子力学中最常用的表象是薛定谔绘景中的坐标表象(位置表象)，有的文献称这种表象为薛定谔表象(Schrödinger representation).

在实际计算中常用薛定谔绘景，因为态矢量(或波函数)随时间变化可直接解微分方程得到. 在难以求出精确解的情况下，往往可用各种近似方法求出近似解. 这种图象的缺点是薛定谔方程在

洛仑兹变换下不是协变的；另外，当有相互作用存在时，薛定谔方程将成为非齐次方程，而且往往也是非线性方程，求解这类方程远较求解线性齐次方程困难得多.

2. 海森堡绘景

(1) 态矢量和算符满足的方程

现在我们保持希尔伯特空间的基矢框架不动，把薛定谔绘景中描写物理状态的态矢量 $|\Psi^S(t)\rangle$ 和算符 A^S 作一显含时间的幺正变换：

$$|\Psi^H\rangle = U^{-1}(t,t_0)|\Psi^S(t)\rangle \tag{17}$$

$$A^H(t) = U^{-1}(t,t_0)A^S U(t,t_0) \tag{18}$$

其中 $U(t,t_0)$ 是具有幺正性质的时间演化算符. 由(17)式和(18)式得到的新态矢量 $|\Psi^H\rangle$ 和算符 $A^H(t)$ 称为海森堡绘景中的态矢量和算符.

考虑到初始条件 $U(t_0,t_0)=1$，代入(18)式可得

$$A^H(t_0) = A^S \tag{19}$$

可见，薛定谔绘景中力学量算符等于海森堡绘景中初始时刻的力学量算符. 因此，(18)式亦可表为

$$A^H(t) = U^{-1}(t,t_0)A^H(t_0)U(t,t_0) \tag{18'}$$

可以证明，海森堡绘景中的态矢量等于薛定谔绘景中初始时刻的态矢量. 事实上，由(17)式和(2)式，得

$$\begin{aligned}|\Psi^H\rangle &= U^{-1}(t,t_0)|\Psi^S(t)\rangle \\ &= U^{-1}(t,t_0)U(t,t_0)|\Psi^S(t_0)\rangle \\ &= |\Psi^S(t_0)\rangle\end{aligned} \tag{17'}$$

可见，海森堡绘景的特点是，态矢量 $|\Psi^H\rangle$ 不随时间改变，但可观察量的算符则随时间而变化. 下面我们来求算符 $A^H(t)$ 随时间变化的规律，对(18)式取时间微分：

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}A^H(t)}{\mathrm{d}t} &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U^{-1}(t,t_0)A^S U(t,t_0) \\ &= \frac{\partial U^{-1}(t,t_0)}{\partial t}A^S U(t,t_0) + U^{-1}(t,t_0)\frac{\partial A^S}{\partial t}U(t,t_0)\end{aligned}$$

$$+U^{-1}(t,t_0)A^S\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0) \tag{20}$$

将(3)式及其共轭方程

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U^{-1}(t,t_0)=U^{-1}(t,t_0)H^S$$

代入(20)式得并注意(18)式,得到

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}A^H(t)}{\mathrm{d}t}&=\frac{i}{\hbar}(H^HA^H=A^HH^H)+U^{-1}(t,t_0)\frac{\partial A^S}{\partial t}U(t,t_0)\\&=\frac{i}{\hbar}[H^H,A^H]+U^{-1}(t,t_0)\frac{\partial A^S}{\partial t}U(t,t_0)\end{aligned} \tag{21}$$

一般地,在薛定谔绘景中,算符 A^S 不显含时间,因而$\frac{\partial A^S}{\partial t}=0$. 于是,(21)式变成

$$\frac{\mathrm{d}A^H(t)}{\mathrm{d}t}=\frac{i}{\hbar}[H^H,A^H] \tag{22}$$

这就是海森堡绘景中算符随时间的变化规律,称为海森堡运动方程.

从上式可以看出,A^H 完全由 H^H 决定,这和薛定谔绘景的情况相类似.当一个体系的哈密顿量给定后,在薛定谔绘景中可通过解薛定谔方程来决定态矢量(或波函数);在海森堡绘景中,则通过解算符方程(22)式得出算符的具体表示式.

当 H 不显含 t 时,$U(t,t_0)$由(4)式给出,这时显然 H^s 与 $U(t,t_0)$对易,由此并利用(18)式可证明

$$\begin{aligned}H^H&=U^{-1}(t,t_0)H^SU(t,t_0)\\&=U^{-1}(t,t_0)U(t,t_0)H^S\\&=H^S\end{aligned}$$

可见,当 H 不显含 t 时,两种图象中的哈密顿量是相等的,于是可略去上标从而得到

$$H^H=H^S\equiv H \tag{23}$$

海森堡绘景与薛定谔绘景是通过幺正变换联系的,因而两种绘景对物理体系的描述是等价的.例如可观察量的平均值在两种绘景中是相同的

$$\langle \Psi^S(t) | A^S | \Psi^S(t) \rangle = \langle \Psi^H | A^H(t) | \Psi^H \rangle$$

又如算符间的代数关系(对易关系)在两种绘景中也有相同的形式,等等,这在§2中已作过证明,不再重复. 特别是,基本量子化条件在两种绘景中也有相同的形式,与§1(11)式对应,我们有

$$\left.\begin{aligned} [q_i^H, q_j^H] &= [p_i^H, p_j^H] = 0 \\ [q_i^H, p_j^H] &= i\hbar\delta_{ij} \end{aligned}\right\} \tag{24}$$

(2) 量子力学与经典力学的关系

因为在薛定谔绘景中是用态矢量随时间的变化来表征物理体系的变化,而态矢量没有经典物理量与之相应,故薛定谔绘景难于直接与经典力学相联系. 而海森堡绘景则是通过物理量随时间的变化来表征物理体系的变化,可以清楚地看出它与经典力学的联系. 现在我们来讨论这个问题.

由基本量子化条件(24)式或§1(8)式和(9)式可推得

$$\left.\begin{aligned} [p_i^n, q_i] &= -i\hbar n p_i^{n-1} = -i\hbar\frac{\mathrm{d}p_i^n}{\mathrm{d}p_i} \\ [q_i^n, p_i] &= i\hbar n q_i^{n-1} = i\hbar\frac{\mathrm{d}q_i^n}{\mathrm{d}q_i} \end{aligned}\right\} \tag{25}$$

故对 q_i 和 p_i 的函数 $F(q_i, p_i)$ 应有

$$\left.\begin{aligned} [F(q_i, p_i), q_i] &= -i\hbar\frac{\partial F}{\partial p_i} \\ [F(q_i, p_i), p_i] &= i\hbar\frac{\partial F}{\partial q_i} \end{aligned}\right\} \tag{26}$$

应用于哈密顿算符,便得

$$\left.\begin{aligned} [H, q_i] &= -i\hbar\frac{\partial H}{\partial p_i} \\ [H, p_i] &= i\hbar\frac{\partial H}{\partial q_i} \end{aligned}\right\} \tag{27}$$

现将算符方程(22)式应用于 q_i^H 和 p_i^H,得

$$\left.\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}q_i^H}{\mathrm{d}t} &= \frac{i}{\hbar}[H, q_i^H] = \{q_i^H, H\}_q \\ \frac{\mathrm{d}p_i^H}{\mathrm{d}t} &= \frac{i}{\hbar}[H, p_i^H] = \{p_i^H, H\}_q \end{aligned}\right\} \tag{28}$$

将(27)式代入(28)式便得

$$\left.\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}q_i^H}{\mathrm{d}t}&=\frac{\partial H}{\partial p_i}=\{q_i^H,H\}_q\\ \frac{\mathrm{d}p_i^H}{\mathrm{d}t}&=-\frac{\partial H}{\partial q_i}=\{p_i^H,H\}_q\end{aligned}\right\}\tag{29}$$

众所周知，在经典力学中一个保守系的广义坐标 q_i 和广义动量 p_i 满足哈密顿正则方程：

$$\left.\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}q_i}{\mathrm{d}t}&=\frac{\partial H}{\partial p_i^H}=\{q_i,H\}_c\\ \frac{\mathrm{d}p_i}{\mathrm{d}t}&=-\frac{\partial H}{\partial q_i^H}=\{p_i,H\}_c\end{aligned}\right\}\tag{30}$$

其中经典泊松括号$\{\quad\}_c$由§1(9)式确定.

比较(29)和(30)式可以看出，海森堡绘景中的量子运动方程(海森堡运动方程)与经典力学中的哈密顿方程形式完全一样. 只要注意经典力学的正则表述方式与海森堡表述方式之间的如下对应关系：

$$\left.\begin{aligned}&q_i\rightarrow q_i^H,p_i\rightarrow p_i^H,H\rightarrow H^H\\ &\{A,B\}_C\rightarrow\{A^H,B^H\}_q=\frac{1}{i\hbar}[A^H,B^H]\\ &\text{正则运动方程}\rightarrow\text{算符运动方程}\end{aligned}\right\}\tag{31}$$

就可实现从经典力学向量子力学的过渡.

(3) 不动基矢与动基矢

为了进一步形象地说明薛定谔绘景与海森堡绘景之间的联系和区别，我们取能量表象为例来分析.

设 H 不显含时间，$|\psi_n\rangle$是体系能量为 E_n 的本征矢，即

$$H|\psi_n\rangle=E_n|\psi_n\rangle\tag{32}$$

根据$\{|\psi_n\rangle\}$的完备性，任意态矢$|\Psi(t)\rangle$可表为

$$|\Psi(t)\rangle=\sum_n c_n(t)|\psi_n\rangle\tag{33}$$

其中

$$c_n(t)=\langle\psi_n|\Psi(t)\rangle\tag{34}$$

将(33)式代入薛定谔方程得

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sum_n c_n(t)|\psi_n\rangle = \sum_n c_n(t)H|\psi_n\rangle$$

$$= \sum_n c_n(t)E_n|\psi_n\rangle$$

上式两边左乘$|\psi_l\rangle$得

$$i\hbar \sum_n \frac{\mathrm{d}c_n(t)}{\mathrm{d}t}\langle\psi_l|\psi_n\rangle = \sum_n c_n(t)E_n\langle\psi_l|\psi_n\rangle$$

利用正交归一化条件$\langle\psi_l|\psi_n\rangle=\delta_{ln}$,对 n 求和便得到

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}c_l(t)}{\mathrm{d}t} = c_l(t)E_l$$

解上式得

$$c_l(t) = c_l(t_0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_l(t-t_0)}$$

或写成

$$c_n(t) = c_n(t_0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)} \tag{35}$$

将上式代入(33)式得

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t_0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}|\psi_n\rangle \tag{36}$$

如果在希尔伯特空间中取$\{|\psi_n\rangle\}$为基矢,则态矢量$\{c_n(t)\}$随时间变化(见(35)式);但是,由于物理量的矩阵元是

$$A_{mn} = \langle\psi_m|A|\psi_n\rangle \tag{37}$$

可见 A_{mn}不随时间变化,这正是薛定谔绘景的描述方式.

现在如果我们取随时间变化的本征矢

$$|\psi_n(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}|\psi_n\rangle \tag{38}$$

作为基矢,则由(36)式可知态矢量便是$\{c_n(t_0)\}$了,它们不随时间而变,但这时物理量的矩阵元是

$$\begin{aligned} A_{mn}(t) &= \langle\psi_m(t)|A|\psi_n(t)\rangle \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n-E_m)(t-t_0)}\langle\psi_m|A|\psi_n\rangle \\ &= A_{mn}e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n-E_m)(t-t_0)} \end{aligned} \tag{39}$$

可见物理量是随时间变化的.这正是海森堡绘景的描述方式.

由上分析可知,在薛定谔绘景中取$\{|\psi_n\rangle\}$为基矢,基矢是不

动的；而在海森堡绘景中则取$\{|\psi_n(t)\rangle\}$为基矢，基矢随时间变化．$|\psi_n(t)\rangle$与$|\psi_n\rangle$之间的关系由(38)式给出．其实，动基矢$|\psi_n(t)\rangle$和不动基矢$|\psi_n\rangle$是通过么正变换联系的：

$$
\begin{aligned}
|\psi_n(t)\rangle &= U(t,t_0)|\psi_n\rangle \\
&= e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H}|\psi_n\rangle \\
&= e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}|\psi_n\rangle
\end{aligned}
$$

这正是(38)式．

由于在薛定谔绘景中基矢不动，可以形象地把态矢量随时间变化看作是态矢量在希尔伯特空间中转动；当从薛定谔绘景过渡到海森堡绘景时，由于进行了么正变换，可以形象地把动基矢看作转动，而态矢量不随时间变化则可看作是态矢量与动基矢一起转动．

我们已经看到，物理体系随时间变化的不同描述方式归结为希尔伯特空间中取不同的基矢集，动基矢与不动基矢只是通过一个周期性的时间因子$e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}$相联系，它们并不是对应于不同物理量的本征矢集，所以与表象变换的概念有区别，这就是不用 representation 而用 picture 的原因．

(4) 几点注意

像在薛定谔绘景中那样，海森堡绘景中也可采用各种表象，其中常用能量表象，有的文献称为海森堡表象（Heisenberg representation）．

海森堡绘景的优点在于：算符运动方程具有经典正则方程的形式，因此可以仿照经典力学的方法处理量子力学体系，进一步可以推广到量子场论．它的缺点是，对每个力学量都必须求解相应的方程，而这些方程往往是难以求解的．

3. 相互作用绘景

对于有相互作用的体系，其哈密顿量往往可以分成两部分：

$$H = H_0 + H_i \tag{40}$$

其中H_0表示无相互作用时的哈密顿量，一般与时间无关，H_i表示

相互作用微扰部分的哈密顿量，一般显含时间，H 为总的哈密顿量．这种情况下采用第三种描述方式即引入相互作用绘景较为方便．

(1) 态矢量和算符的运动方程

设相互作用绘景中态矢量记为 $|\Psi^I(t)\rangle$，可观察量的算符记为 $A^I(t)$．借助于如下的幺正变换可以从薛定谔绘景过渡到相互作用绘景：

$$|\Psi^I(t)\rangle = U_0^{-1}(t,t_0)|\Psi^S(t)\rangle \tag{41}$$

$$A^I(t) = U_0^{-1}(t,t_0)A^S U_0(t,t_0) \tag{42}$$

其中 $U(t,t_0)$是幺正算符，即

$$U_0^{\dagger}(t,t_0) = U_0^{-1}(t,t_0) \tag{43}$$

并且它满足算符方程：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U_0(t,t_0) = H_0^S U_0(t,t_0) \tag{44}$$

当 H_0^S 不显含 t 时，上式的解为

$$U_0(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H_0^S} \tag{45}$$

由上式可知，H_0^S 与 U_0 对易．令(42)式中 $A^S=H_0^S$，则有

$$H_0^H = U_0^{-1}H_0^S U_0 = U_0^{-1}U_0 H_0^S = H_0^S \tag{46}$$

可见，当 H_0^S 不显含 t 时，在薛定谔绘景和相互作用绘景中，H_0 是一样的，故可写成

$$H_0^S = H_0^I \equiv H_0 \tag{47}$$

现在求态矢量 $|\Psi^I(t)\rangle$满足的方程．对(41)式两边求时间微商，得

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}|\Psi^I(t)\rangle &= \frac{\partial}{\partial t}(U_0^{-1}|\Psi^S(t)\rangle) \\ &= \frac{\partial U_0^{-1}}{\partial t}|\Psi^S(t)\rangle + U_0^{-1}\frac{\partial}{\partial t}|\Psi^S(t)\rangle\end{aligned} \tag{48}$$

由(44)式取共轭并注意(43)式得

$$\frac{\partial}{\partial t}U_0^{-1} = \frac{i}{\hbar}U_0^{-1}H_0 \tag{49}$$

将上式及薛定谔方程代入(48)式，并注意(40)、(41)、(42)诸式，得

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi^I(t)\rangle = H_i^H|\Psi^I(t)\rangle \tag{50}$$

上式就是态矢量随时间变化的规律.

其次我们来求可观察量的算符随时间变化的规律. 对(42)式求时间微商:

$$\frac{\mathrm{d}A^I(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial U_0^{-1}}{\partial t}A^S U_0 + U_0^{-1}A^S\frac{\partial}{\partial t}U_0 \tag{51}$$

其中已设 A^S 不显含时间,即$\frac{\partial A^S}{\partial t}=0$,将(44)和(49)式代入(51)式,并利用 U_0 和 H_0 的对易性质和(42)式,得

$$\frac{\mathrm{d}A^I(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{i}{\hbar}[H_0, A^I] \tag{52}$$

上式就是算符的运动方程.

由(50)式和(52)式我们可以得出结论,在相互作用绘景里,态矢量和算符两者均随时间变化. 态矢量满足的方程(50)式与薛定谔绘景中的运动方程具有相同的形式,只是用 H_i^I 取代 $H^S(=H)$. 所以,矢态量随时间的变化由相互作用哈密顿量 H_i^I 决定. 而算符满足的方程则与海森堡绘景中的算符运动方程形式一致,只是用 H_0 取代 $H^H(=H)$. 所以,算符随时间的变化由无相互作用的哈密顿量 H_0 决定. 这就是相互作用绘景的特征,也是这种描述方式的优越性所在,它兼有前两种描述方式的优点,对实际问题的计算(如辐射问题、散射问题)带来很大的方便. 量子场论中微扰论计算往往就是采用这种绘景.

(2) 由海森堡绘景过渡到相互作用绘景

我们也可以从海森堡绘景通过幺正变换过渡到相互作用绘景

$$|\Psi^I(t)\rangle = U_i(t,t_0)|\Psi^H\rangle \tag{53}$$

$$A^I(t) = U_i(t,t_0)A^H U_i^{-1}(t,t_0) \tag{54}$$

注意到(17)式和(41)式有

$$\begin{aligned}|\Psi^I(t)\rangle &= U_0^{-1}(t,t_0)|\Psi^S(t)\rangle \\ &= U_0^{-1}(t,t_0)U(t,t_0)|\Psi^H(t)\rangle\end{aligned} \tag{55}$$

也可以用此式来定义相互作用绘景中的态矢量 $|\Psi^I(t)\rangle$. 对比(53)

与(55)式可得

$$U_i(t,t_0) = U_0^{-1}(t,t_0)U(t,t_0) \tag{56}$$

因为 $U_0^{-1}(t,t_0)$和 $U(t,t_0)$都是幺正算符,而幺正算符的乘积仍是幺正算符,故 $U_i(t,t_0)$也是幺正算符:

$$U_i^{+}(t,t_0) = U_i^{-1}(t,t_0) \tag{57}$$

$U_i(t,t_0)$满足的方程可由 $U_0(t,t_0)$,$U(t,t_0)$所满足方程求得,注意到(3)式和(44)式的共轭式

$$-i\hbar\frac{\partial U_0^{+}(t,t_0)}{\partial t} = U_0^{+}(t,t_0)H_0^{S}$$

以及(54)式、(57)式和(18)式,则由(56)式得

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U_i(t,t_0) = H_1^{I}U_i(t,t_0) \tag{58}$$

上式就是幺正算符 $U_i(t,t_0)$所满足的方程.因为 $U_0(t_0,t_0)=1$,$U(t_0,t_0)=1$,故由(56)式可知 $U_i(t,t_0)$的初始条件为

$$U_i(t_0,t_0) = 1 \tag{59}$$

根据定义(53)和(54)两式,可分别得到(50)式和(52)式,不再赘述.

(3) 时间演化算符

最后,我们指出,在相互作用绘景中也可以像薛定谔绘景那样,引入时间演化算符把$|\Psi^I(t)\rangle$与$|\Psi^I(t_0)\rangle$联系起来,即

$$|\Psi^I(t)\rangle = U_i(t,t_0)|\Psi^I(t_0)\rangle \tag{60}$$

象薛定谔绘景中的做法一样,将上式代入(50)式即可得出 $U_i(t,t_0)$所满足的方程:

$$i\hbar\frac{\partial U_i(t,t_0)}{\partial t} = H_1^{I}U_i(t,t_0) \tag{61}$$

并且具有初始条件

$$U_i(t_0,t_0) = 1 \tag{62}$$

以上两式正是(58)式和(59)式.所以,联系$|\Psi^I(t)\rangle$和$|\Psi^I(t_0)\rangle$的时间演化算符 $U_i(t,t_0)$就是由海森堡绘景过渡到相互作用绘景的幺正变换算符,这与联系$|\Psi^S(t)\rangle$和$|\Psi^S(t_0)\rangle$的时间演化算符 $U(t,t_0)$就是由薛定谔绘景过渡到海森堡绘景的幺正变换算符的情形是一

样的.

象在薛定谔绘景中那样，如果相互作用哈密顿量 H_i^H 不显含时间，则(61)式的解为

$$U_i(t,t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t,t_0)H_i^I} \tag{63}$$

如果 H_i^I 显含时间，则(61)式可化为积分方程：

$$U_i(t,t_0) = 1 + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} H_i^I(t')U_i(t',t_0)\mathrm{d}t' \tag{64}$$

若相互作用很弱，可作微扰处理. 用迭代法可求得微扰展开级数，详见第八章 § 5.

§ 4 算符的本征值和本征矢的计算

本节我们在薛定谔绘景中，利用直接矢量形式(算符方法)和各种表象求解定态的薛定谔方程(即 H 的本征方程)

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \tag{1}$$

为了具体起见，用一维线性谐振子为例子，它的哈密顿量的具体形式是

$$H = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \tag{2}$$

我们将用算符方法和分别在 H 表象、x 表象和 p 表象中求解线性谐振子的能量本征值和本征矢(或本征函数).

1. 算符方法

算符方法的特点是直接从对易关系求出能量的本征值和本征矢，更突出地显示出量子化条件所起的作用，而不必借助于具体的表象.

(1) 升算符和降算符 · 谐振子的能量本征值和本征矢

考虑两个算符，它们是算符 p 和 x 的函数，定义如下：

$$a \equiv (2m\hbar\omega)^{-\frac{1}{2}}(m\omega x + ip) \tag{3}$$

$$a^+ \equiv (2m\hbar\omega)^{-\frac{1}{2}}(m\omega x - ip) \tag{4}$$

注意 a 和 a^+ 不是厄密算符，因为 $a^+ \neq a$.

利用 x 和 p 之间的对易关系，可以求出 a 和 a^+ 之间的对易关系. 为此，先求

$$
\begin{aligned}
a^+ a &= (2m\hbar\omega)^{-1}(m\omega x - ip)(m\omega x + ip) \\
&= (\hbar\omega)^{-1}(H - \frac{1}{2}\hbar\omega)
\end{aligned}
\tag{5}
$$

其中最后一步利用了 x 和 p 的对易关系 $xp - px = i\hbar$.

同样可求得

$$
aa^+ = (\hbar\omega)^{-1}(H + \frac{1}{2}\hbar\omega) \tag{6}
$$

(6)式减去(5)式便得到 a 和 a^+ 的对易关系

$$
[a, a^+] \equiv aa^+ - a^+ a = 1 \tag{7}
$$

由(5)式可得到 H 的另一种形式：

$$
H = \hbar\omega(a^+ a + \frac{1}{2}) \tag{8}
$$

由(8)式可见，求 H 的本征值和本征矢可归结为求 a^+a 的本征值和本征矢(注意 a^+a 是厄密算符).

为了简单和以后需要，我们令

$$
N = a^+ a \tag{9}
$$

设算符 N 的本征值为 n，相应的归一化本征矢为 $|n\rangle$，则有 N 的本征方程

$$
N|n\rangle = n|n\rangle \tag{10}
$$

首先证明 $n \geqslant 0$. 为此，用 $\langle n|$ 左乘上式两边，得

$$
\langle n|N|n\rangle = n\langle n|n\rangle = n
$$

将(9)式代入上式得

$$
n = \langle n|a^+ a|n\rangle = |a|n\rangle|^2 \geqslant 0 \tag{11}
$$

可见，N 的本征值必不小于零.

利用对易关系(7)式，及本征方程(10)式，我们有

$$
\begin{aligned}
Na|n\rangle &= a^+ aa|n\rangle \\
&= (aa^+ - 1)a|n\rangle \\
&= aa^+ a|n\rangle - a|n\rangle \\
&= aN|n\rangle - a|n\rangle
\end{aligned}
$$

$$=(n-1)a|n\rangle \tag{12}$$

由上式可以看出，$a|n\rangle$也是 N 的本征矢，相应本征值为 $n-1$. 因此，$a|n\rangle$与本征值为 $n-1$ 的本征矢 $|n-1\rangle$应只相差一个常数因子：

$$a|n\rangle = c_n|n-1\rangle \tag{13}$$

c_n 的数值确定如下. 上式乘以自己的厄密共轭，得

$$\langle n|a^+ a|n\rangle = \langle n-1|c_n^+ c_n|n-1\rangle$$

即

$$n\langle n|n\rangle = |c_n|^2\langle n-1|n-1\rangle$$

注意到归一化条件$\langle n|n\rangle=1$，$\langle n-1|n-1\rangle=1$，由上式可得

$$|c_n|^2 = n \tag{14}$$

故

$$c_n = \sqrt{n}\,e^{i\varphi} \tag{15}$$

不失一般性，取 $\varphi=0$，于是

$$c_n = \sqrt{n} \tag{16}$$

代入(13)式得

$$a|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \tag{17}$$

由(12)式可知，a 作用于$|n\rangle$所得的 $a|n\rangle$仍是 N 属于本征值为 $n-1$ 的本征矢，又由(17)式看出 $a|n\rangle$与$|n-1\rangle$表示同一状态，故 a 作用于$|n\rangle$得到 N 的本征值为 $n-1$ 的本征矢$|n-1\rangle$. 所以，我们称 a 为降算符(lowering operator).

可以证明，

$$Na^2|n\rangle = (n-2)a^2|n\rangle$$
$$Na^3|n\rangle = (n-3)a^3|n\rangle$$
$$\cdots\cdots\cdots\cdots$$

于是，$n,n-1,n-2,\cdots$都是 N 的本征值，但上面已经证明 $n\geqslant 0$，则同时满足这两个条件的 n 只能是零和正整数，否则 n 会出现负数，这是不允许的. 这样，我们得到结论：

$$n = 0,1,2,3\cdots \tag{18}$$

类似(12)式的计算，可得

$$Na^+|n\rangle = (n+1)a^+|n\rangle \tag{19}$$

类似(17)式的计算过程,可得

$$a^{+}|n\rangle=\sqrt{(n+1)}|n+1\rangle \tag{20}$$

由于(19)式和(20)式,我们称 a^{+}为升算符(raising operator).

现在我们回到线性谐振子的哈密顿算符(8)式

$$\begin{aligned} H &= \hbar\omega(a^{+}a+\frac{1}{2}) \\ &= \hbar\omega(N+\frac{1}{2}) \end{aligned} \tag{21}$$

由上式可见,N 和 H 对易,它们有公共本征矢.因为$|n\rangle$是 N 的本征矢,即 $N|n\rangle=n|n\rangle$,设$|n\rangle$也是 H 的本征矢,即

$$H|n\rangle=E_n|n\rangle \tag{22}$$

将(21)式代入上式得

$$\hbar\omega(N+\frac{1}{2})|n\rangle=E_n|n\rangle$$

代入(10)式并注意到(18)式上式成为

$$\hbar\omega(n+\frac{1}{2})|n\rangle=E_n|n\rangle$$

由此得到线性谐振子的能量(H 的本征值)为

$$E=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega,\quad n=0,1,2,3\cdots \tag{23}$$

从基态本征矢$|0\rangle$出发,重复作用 a^{+}于$|0\rangle$上,可求出线性谐振子的 H 的一系列本征矢:

$$\left.\begin{aligned} &|0\rangle \\ &|1\rangle=a^{+}|0\rangle \\ &|2\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}a^{+}|1\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(a^{+})^{2}|0\rangle \\ &|3\rangle=\frac{1}{\sqrt{3}}a^{+}|2\rangle=\frac{1}{\sqrt{3!}}(a^{+})^{3}|0\rangle \\ &\cdots\cdots\cdots\cdots \\ &|n\rangle=\frac{1}{\sqrt{n}}a^{+}|n-1\rangle=\frac{1}{\sqrt{n!}}(a^{+})^{n}|0\rangle \end{aligned}\right\} \tag{24}$$

而$|0\rangle$满足

$$a|0\rangle = 0 \tag{25}$$

至此,问题全部解决.

(2) 粒子数表象·矩阵表示

现在我们回到(9)式定义的算符 $N=a^+a$,可把它称为粒子数算符(number operator).由(10)式和(18)式可知,$n=0,1,2,3,\cdots$是粒子数算符的本征值,可看作是粒子数. $|n\rangle$为相应的本征矢.

有了 H 或 N 的全部本征矢,我们就可以在希尔伯特空间中以$\{|n\rangle\}$为基矢建立起 H 表象(能量表象)或粒子数表象(占有数表象 occupation representation).在这个表象中,算符 a 和 a^+的矩阵元分别由(17)式和(20)式得出:

$$\begin{aligned}\langle n'|a|n\rangle &= \sqrt{n}\langle n'|n-1\rangle \\ &= \sqrt{n}\,\delta_{n',n-1}\end{aligned} \tag{26}$$

$$\begin{aligned}\langle n'|a^+|n\rangle &= \sqrt{n+1}\langle n'|n+1\rangle \\ &= \sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1}\end{aligned} \tag{27}$$

即

$$a = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \tag{28}$$

$$a^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \tag{29}$$

其中矩阵的行列号按 0,1,2…次序排列.

容易得到 $N=a^+a$ 的矩阵是对角矩阵,即

$$\langle n'|N|n\rangle = n\langle n'|n\rangle = n\delta_{n'n} \tag{30}$$

可见对角元素即为 N 的本征值 $n=0,1,2,\cdots$，即

$$N=\begin{pmatrix}0 & 0 & 0 & 0 & \cdots\\ 0 & 1 & 0 & 0 & \cdots\\ 0 & 0 & 2 & 0 & \cdots\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\end{pmatrix} \tag{31}$$

根据(21)式，在 N 表象(H 表象)中，H 的矩阵元为

$$\begin{aligned}\langle n'|H|n\rangle &= \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\langle n'|n\rangle\\ &= \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\delta_{n'n}\end{aligned} \tag{32}$$

故 H 的矩阵为对角矩阵，对角矩阵元为 H 的本征值，即

$$H=\hbar\omega\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 & \cdots\\ 0 & \frac{3}{2} & 0 & 0 & \cdots\\ 0 & 0 & \frac{5}{2} & 0 & \cdots\\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots\end{pmatrix} \tag{33}$$

由(3)式和(4)式可解出 x 和 p：

$$x=\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2}(a+a^{+}) \tag{34}$$

$$p=-i\left(\frac{m\hbar\omega}{2}\right)^{1/2}(a-a^{+}) \tag{35}$$

于是，得到 N 表象中 x 和 p 的矩阵元：

$$\langle n'|x|n\rangle=\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2}\left(\sqrt{n}\,\delta_{n'n-1}+\sqrt{n+1}\,\delta_{n'n+1}\right) \tag{36}$$

$$\langle n'|p|n\rangle=-i\left(\frac{m\hbar\omega}{2}\right)^{1/2}\left(\sqrt{n}\,\delta_{n'n-1}-\sqrt{n+1}\,\delta_{n'n+1}\right) \tag{37}$$

其矩阵形式分别为

$$x=\left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2}\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \tag{36'}$$

$$p=-i\left(\frac{m\hbar\omega}{2}\right)^{1/2}\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ -\sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \tag{37'}$$

在 N 表象中，N 的本征矢（即 H 的本征矢）的矩阵形式是

$$|0\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\\0\\ \vdots\\ \vdots\end{pmatrix},\quad |1\rangle=\begin{pmatrix}0\\1\\0\\0\\ \vdots\\0\end{pmatrix},\quad |2\rangle=\begin{pmatrix}0\\0\\1\\0\\ \vdots\\0\end{pmatrix},\quad \cdots,|n\rangle=\begin{pmatrix}0\\0\\ \vdots\\1\\0\\ \vdots\end{pmatrix} \tag{38}$$

若将(29)式分别作用于(38)式中各式，便得到(24)式的结果.(33)式也与(23)式的结果相同.

(3)x 表象

我们也可以把直接矢量计算的结果取 x 表象，以便求出本征函数的具体形式，看出粒子在空间的几率分布情况.

在 x 表象中，x 和 p 的算符形式是已知的：

$$x=x,\quad p=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \tag{39}$$

于是，(3)式变成

$$a=\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega x+\hbar\frac{\partial}{\partial x})$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}(\xi+\frac{\partial}{\partial\xi}) \tag{40}$$

其中 $$\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x=\alpha x,\quad \alpha=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \tag{41}$$

同样，(4)式变成

$$a^{+}=\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega x-ip)$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}(\xi-\frac{\partial}{\partial\xi}) \tag{42}$$

我们首先求 $\psi_0(x)=\langle x|0\rangle$. 注意到 $a|0\rangle=0$ 在 x 表象中的形式为

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\xi+\frac{\partial}{\partial\xi})\psi_0(\xi)=0 \tag{43}$$

这是一个一阶微分方程，它的解是

$$\psi_0(\xi)=N_0e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \tag{44}$$

式中 N_0 由归一化条件 $\int|\psi_0(x)|^2\mathrm{d}x=1$ 确定：

$$N_0=(\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{1/4}$$

于是得到归一化的 $\psi_0(\xi)$：

$$\psi_0(\xi)=(\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{1/4}e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \tag{45}$$

有了 $\psi_0(x)=\langle x|0\rangle$，就可以利用升算符 a^+ 即(42)式依次求出 $\psi_1(x)=\langle x|1\rangle$，$\psi_2(x)=\langle x|2\rangle$，…，$\psi_n(x)=\langle x|n\rangle$，…. 先求 $\psi_1(\xi)$：

$$\psi_1(\xi)=a^+\psi_0(\xi)=\frac{1}{\sqrt{2}}(\xi-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi})\psi_0(\xi)$$

利用算符公式 $$\xi-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}=-e^{-\frac{1}{2}\xi^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$

则 $$\psi_1(\xi)=-\frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{1/4}e^{\frac{1}{2}\xi^2}\frac{d}{d\xi}e^{-\frac{1}{2}\xi^2}\cdot e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{1/4}e^{-\frac{1}{2}\xi^2}(-e^{\xi^2}\frac{d}{d\xi}e^{-\xi^2})$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}\psi_0(\xi)H_1(\xi) \tag{46}$$

式中 $$H_1(\xi)=-e^{\xi^2}\frac{d}{d\xi}e^{-\xi^2}$$

现在求 $\psi_2(\xi)$. 由 $|2\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}a^+|1\rangle$有

$$\psi_2(\xi)=\frac{1}{\sqrt{2}}a^+\psi_1(\xi)=\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2}}(\xi-\frac{d}{d\xi})\psi_1(\xi)$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2}}(-e^{\frac{1}{2}\xi^2}\frac{d}{d\xi}e^{-\frac{1}{2}\xi^2})\frac{1}{\sqrt{2}}(\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{1/4}e^{-\frac{1}{2}\xi^2}(-e^{\xi^2}\frac{d}{d\xi}e^{-\xi^2})$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2^2\cdot 2}}(\frac{m\omega}{\pi\hbar})^{1/4}e^{-\frac{1}{2}\xi^2}[(-1)^2(e^{\xi^2}\frac{d^2}{d\xi^2}e^{-\xi^2})]$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2^2\cdot 2}}\psi_0(\xi)H_2(\xi) \tag{47}$$

式中 $$H_2(\xi)=(-1)^2e^{\xi^2}\frac{d^2}{d\xi^2}e^{-\xi^2}$$

如此继续下去,对 $\psi_n(\xi)$,有

$$\psi_n(\xi)=\frac{1}{\sqrt{2^n\cdot n!}}(\frac{n\omega}{\pi\hbar})^{1/4}e^{-\frac{1}{2}\xi^2}H_n(\xi)$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2^n\cdot n!}}\psi_0(\xi)H_n(\xi) \tag{48}$$

其中 $$H_n(\xi)=(-1)^n e^{\xi^2}\frac{d^n}{d\xi^n}e^{-\xi^2} \tag{49}$$

是厄密多项式.

(48)式也可以写成

$$\psi_n(\xi)=N_n e^{-\frac{1}{2}\xi^2}H_n(\xi) \tag{50}$$

其中 $$N_n=(\frac{a}{\pi^{1/2}2^n n!})^{1/2} \tag{51}$$

α 由(41)式给出.

以上结果与在坐标表象中直接解薛定谔方程所得结果完全一致.

2. 在能量表象中的计算

我们也可以用 H 表象矩阵形式来进行计算，这样不必知道基矢的任何知识.

由 $H=\frac{1}{2m}p^2+\frac{m\omega^2}{2}x^2$，可得

$$\frac{\partial H}{\partial x} = m\omega^2 x \tag{52}$$

$$\frac{\partial H}{\partial p} = \frac{1}{m}p \tag{53}$$

代入 § 3(27)式得

$$m\omega^2 x = -\frac{i}{\hbar}(Hp - pH) \tag{54}$$

$$\frac{1}{m}p = \frac{i}{\hbar}(Hx - xH) \tag{55}$$

取(54)式的 jk 矩阵元

$$\begin{aligned}\langle j|m\omega^2 x|k\rangle &= -\frac{i}{\hbar}\langle j|(Hp - pH)|k\rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar}(E_j\langle j|p|k\rangle - E_k\langle j|p|k\rangle)\end{aligned}$$

即
$$m\omega^2 x_{jk} = -\frac{i}{\hbar}(E_j - E_k)p_{jk} \tag{56}$$

同理，取(55)式的 jk 矩阵元

$$\frac{1}{m}p_{jk} = \frac{i}{\hbar}(E_j - E_k)x_{jk} \tag{57}$$

由上两式可得

$$\left.\begin{aligned} m\omega^2 x_{jk} + \frac{i}{\hbar}(E_j - E_k)p_{jk} = 0 \\ -\frac{i}{\hbar}(E_j - E_k)x_{jk} + \frac{1}{m}p_{jk} = 0\end{aligned}\right\} \tag{58}$$

上式是关于 x_{jk}和 p_{jk}的齐次线性方程，有非零解的条件是系数行列

式为零：

$$\begin{vmatrix} m\omega^2 & \frac{i}{\hbar}(E_j - E_k) \\ -\frac{i}{\hbar}(E_j - E_k) & \frac{1}{m} \end{vmatrix} = 0$$

由此得
$$(E_j - E_k)^2 = (\hbar\omega)^2 \tag{59}$$
若 $E_j - E_k$ 不满足上式，则 $x_{jk} = p_{jk} = 0$. 由上式知，H 的本征值应当是相差 $\hbar\omega$ 的一系列分立的等间距数值，设为

$$E_j = (j + \varepsilon)\hbar\omega, \quad j = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \tag{60}$$
$$0 \leqslant \varepsilon < 1$$

这时，不为零的矩阵元是

$$p_{jk} = p_{jk}(\delta_{k,j+1} + \delta_{k,j-1}) \tag{61}$$

$$x_{jk} = x_{jk}(\delta_{k,j+1} + \delta_{k,j-1}) \tag{62}$$

下面求 H_{jk}：

$$\begin{aligned} H_{jk} &= \frac{1}{2m}p_{jk}^2 + \frac{m\omega^2}{2}x_{jk}^2 \\ &= \frac{1}{2m}\sum_l p_{jl}p_{lk} + \frac{m\omega^2}{2}\sum_l x_{jl}x_{lk} \end{aligned} \tag{63}$$

今由(56)式解出

$$x_{jk} = -\frac{i}{\hbar\omega^2 m}(E_j - E_k)p_{jk} \tag{64}$$

代入(63)式得

$$H_{jk} = \frac{1}{2m}\sum_l p_{jl}p_{lk} - \frac{1}{2m}\frac{1}{\hbar^2\omega^2}\sum_l (E_j - E_l)p_{jl}(E_l - E_k)p_{lk}$$

利用(60)式有

$$E_j - E_l = \hbar\omega(j - l)$$

$$E_l - E_k = \hbar\omega(l - k)$$

注意到(61)和(62)式以及上面两式，则

$$H_{jk} = \frac{1}{2m}\sum_l [1 - (j - l)\cdot(l - k)]p_{jl}p_{lk}$$

$$=\frac{1}{2m}\sum_{l}[1-(j-l)\cdot(l-k)]p_{jl}(\delta_{l,j+1}+\delta_{l,j-1})$$

$$\times p_{lk}(\delta_{k,l+1}+\delta_{k,l-1})$$

$$=\frac{1}{2m}[(2+j-k)p_{j,j+1}p_{j+1,k}+(2-j+k)p_{j,j-1}p_{j-1,k}]\delta_{jk}$$

故
$$H_{jj}=\frac{1}{m}[p_{j,j+1}p_{j+1,j}+p_{j,j-1}p_{j-1,j}] \tag{65}$$

另一方面，$H_{jk}=E_k\delta_{jk}$，即

$$H_{jj}=E_j \tag{66}$$

将(60)式代入上式得

$$H_{jj}=E_j=(j+\varepsilon)\hbar\omega \tag{67}$$

比较(65)和(67)式可得

$$p_{j,j+1}p_{j+1,j}+p_{j,j-1}p_{j-1,j}=(j+\varepsilon)m\hbar\omega \tag{68}$$

由 p 的厄密性有

$$p_{j,j\pm1}=p^*_{j\pm1,j} \tag{69}$$

(68)式成为

$$|p_{j,j+1}|^2+|p_{j-1,j}|^2=(j+\varepsilon)m\hbar\omega \tag{70}$$

可见，上式右边必须不为负，即 $j\geqslant0$. 设上式的解可以写成

$$p_{j,j+1}=c\sqrt{j+\alpha},\qquad p_{j-1,j}=c\sqrt{(j-1)+\alpha} \tag{71}$$

代入(70)式确定 c 和 α，即

$$|c|^2(j+\alpha)+|c|^2(j-1+\alpha)=(j+\varepsilon)m\hbar\omega$$

可见①

$$|c|^2=\frac{m\hbar\omega}{2},\quad c=i\left(\frac{m\hbar\omega}{2}\right)^{1/2} \tag{72}$$

$$\alpha=\varepsilon+\frac{1}{2} \tag{73}$$

代入(71)式得

---

① (72)式中取 $c=i\frac{m\hbar\omega}{2}$是为了使所得 x 和 p 的矩阵元表示式与(36)和(37)两式一致.

$$\left.\begin{aligned} p_{j,j+1} &= i\sqrt{m\hbar\omega/2}\sqrt{j+\alpha} \\ p_{j-1,j} &= i\sqrt{m\hbar\omega/2}\sqrt{(j-1)+\alpha} \end{aligned}\right\} \tag{74}$$

下面确定 α. (70)式是一个递推公式，由 $p_{j,j+1}$即可推出 $p_{j-1,j}$. 为了保证 $j\geqslant 0$，这个递推公式必须在 $j=0$处中断，否则将推出许多 j 为负的矩阵元. 中断的要求就是 $p_{-1,0}=0$，由(74)式第二式得

$$p_{-1,0} = c\sqrt{-1+\alpha} = 0$$

由此得

$$\alpha = +1 \tag{75}$$

代入(73)式得

$$\varepsilon = \alpha - \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \tag{76}$$

再将 $\alpha=1$代入(74)式，得

$$p_{j,j+1} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\sqrt{j+1} \tag{77}$$

$$p_{j,j-1} = -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\sqrt{j} \tag{78}$$

将(76)式代入(60)式，并注意 $j\geqslant 0$，得到能量本征值为

$$E_j = (j+\frac{1}{2})\hbar\omega, \quad j = 0,1,2,\cdots \tag{79}$$

将(79)式及(77)式代入(64)式得

$$x_{j,j+1} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\sqrt{j+1} \tag{80}$$

将(79)式及(77)式代入(64)式则得

$$x_{j,j-1} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\sqrt{j} \tag{81}$$

最后，若用 n 来代替 j，则有

$$E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega, \quad n = 0,1,2,3,\cdots \tag{82}$$

$$x_{n,n+1} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\sqrt{n+1} \tag{83}$$

$$x_{n,n-1} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\sqrt{n} \tag{84}$$

$$p_{n,n+1} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\sqrt{n+1} \tag{85}$$

$$p_{n,n-1} = -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\sqrt{n} \tag{86}$$

(83)－(86)诸式与(36)及(37)两式一致.

3. 在 x 表象中计算

将(39)式代入(2)式并取 x 表象，便得到 $H|\psi\rangle=E|\psi\rangle$ 在 x 表象中的形式：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}^2x}\psi(x) + \frac{m\omega^2}{2}x^2\psi(x) = E\psi(x) \tag{87}$$

这是关于 $\psi(x)$ 的微分方程，它的解是我们熟悉的，不再赘述，只将结果写下：

$$E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega, \quad n = 0,1,2,3,\cdots$$

$$\psi_n(\xi) = (\frac{\alpha}{\pi^{1/2}2^n n!})^{1/2}e^{-\frac{1}{2}\xi^2}H_n(\xi)$$

或

$$\psi_n(x) = (\frac{\alpha}{\pi^{1/2}2^n n!})^{1/2}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}H_n(\alpha x)$$

$$\xi = \alpha x, \quad \alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

4. 在 p 表象中计算

在 p 表象中，$p=p, x=i\hbar\frac{\partial}{\partial p}$. 设 p 表象中波函数用 $\varphi_n(p)$ 表示，则 $H|\psi\rangle=E|\psi\rangle$ 在 p 表象中的形式是

$$(\frac{1}{2m}p^2 - \frac{m\omega^2\hbar^2}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}p^2})\varphi(p) = E\varphi(p) \tag{88}$$

令

$$p = m\omega y \tag{89}$$

则(88)式变成

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2}\varphi(y) + \frac{m\omega^2}{2}y^2\varphi(y) = E\varphi(y) \tag{90}$$

它的形式与 x 表象中的微分方程(87)完全一致，由此立即可得到它的解为

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega, \quad n = 0,1,2,3,\cdots \tag{91}$$

$$\varphi_n(y) = c_n e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 y^2} H_n(\alpha y) \tag{92}$$

注意到(89)式，上式变成

$$\varphi_n(p) = c_n e^{-\frac{1}{2}\frac{1}{m\hbar\omega}p^2} H_n(\frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}p) \tag{93}$$

$$c_n = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}}\sqrt[4]{\frac{1}{\pi m\hbar\omega}} = (\frac{1}{(\pi m\hbar\omega)^{1/2}2^n n!})^{1/2} \tag{94}$$

第六章　量子力学中的对称性

§1　对称性与对称性变换

1.对称性的意义

在物理学中——无论是在经典力学中或者是在量子力学中，对称性(symmetry)都起着重要的作用.特别是随着近代物理学的发展，更显得对称性理论的重要.人们对于对称性的认识，可以追溯到没有文字记载的史前时期.古代人类使用的工具、祭祀器皿及装饰品往往具有某种空间对称性.中国历代的建筑，往往具有很高程度的左右对称性.这种对称性的概念，很早就为物理学家们注意到，并且得出了许多有用的结果.

在经典物理学中，对称性的重要性可从下述两方面看到：

(1) 对称性可以简化某些物理量之间的关系.

例如光或电磁波在各向不同性介质（例如晶体）中的传播规律是相当复杂的.在这类介质中，电位移矢量 $\boldsymbol{D}$ 与电场强度 $\boldsymbol{E}$ 一般不同向（磁感应强度 $\boldsymbol{B}$ 与磁场强度 $\boldsymbol{H}$ 也有类似情况），它们之间通过介电张量 ε_{ij} 来联系，即

$$D_i = \sum_j \varepsilon_{ij} E_j \quad (i,j = 1,2,3)$$

可以证明，在保证能量守恒条件下，$\varepsilon_{ij}=\varepsilon_{ji}$（对称张量），所以它有 6 个独立的变量，经过主轴变换后

$$D_x = \varepsilon_x E_x, \quad D_y = \varepsilon_y E_y, \quad D_z = \varepsilon_z E_z$$

$\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z$ 称为主介电系数.在 $\varepsilon_x \neq \varepsilon_y \neq \varepsilon_z$ 情况下，一般说来，$\boldsymbol{D}$ 与 $\boldsymbol{E}$ 方向不同，此时将发生各种奇异现象，例如双折射等.但如果介质是各向同性的，即 $\varepsilon_x=\varepsilon_y=\varepsilon_z$，则只有一个介电系数，这时 $\boldsymbol{D}=\varepsilon\boldsymbol{E}$，$\boldsymbol{D}$ 与

E 同向. 对于磁各向同性介质，$\boldsymbol{B}=\mu\boldsymbol{H}$，$\mu$ 为导磁系数. 这样，在均匀各向同性介质中，电磁场的波动方程将大大简化，只含两个常数 ε 与 μ，电磁波的传播速度为 $v=\frac{c}{\sqrt{\varepsilon\mu}}$，$c$ 为真空中的光速.

(2) 对称性可以导致某些守恒量(运动积分)的存在，也就是说，守恒定律的存在，是与体系的某种对称性相联系的.

在经典力学中，一个体系的守恒定律与体系对称性的密切联系，首先为雅科毕(Jacobi)注意到. 1842 年他就指出，对于一个能够用拉氏量 L(Lagrangian)来描述的体系，L 在体系平移下的不变性将导致动量守恒，在空间转动下的不变性将导致角动量守恒. 许茨(J. R. Schütz)(1897 年)指出，L 在时间平移下的不变性将导致能量守恒. 这些结论的普遍证明，可参阅朗道和栗弗席兹著《力学》第一章.

在量子力学中，时空对称性同样可导致能量、动量、角动量守恒. 此外，还导致没有经典类比的宇称守恒. 除了时空对称性之外，还存在其他性质的对称性，亦导致相应的守恒定律，例如规范不变性导致电荷守恒，等等. 本章讨论各种守恒定律与对称性的关系，以及对称性导致的其他结果.

2. 对称性变换

(1)幺正变换与反幺正变换

物理体系的对称性，通过一定的变换表现出来. 即一个体系的某种对称性，在数学上可以通过体系(或哈密顿量)在一定变换下物理性质的不变性来描述. 我们称这种保持体系物理性质不变的变换为对称性变换.

在量子力学中，体系的状态用希尔伯特空间中的矢量 $|\Psi\rangle$ 来表示，力学量用此空间中的线性厄密算符 A 表示. 对体系施以对称性变换 U 后，状态改变为 $|\Psi'\rangle$，即

$$|\Psi'\rangle = U|\Psi\rangle \tag{1}$$

体系的另一状态 $|\Phi\rangle$ 则变为 $|\Phi'\rangle$. 由于对称变换不改变体系的物理性质，所有测量结果都不因对称变换而改变. 因此，在 $|\Psi'\rangle$ 态测量

结果为$|\Phi'\rangle$的几率应等于在$|\Psi\rangle$态测量结果为$|\Phi\rangle$的几率,即

$$|\langle\Phi'|\Psi'\rangle|^2 = |\langle\Phi|\Psi\rangle|^2 \tag{2}$$

或

$$|\langle\Phi'|\Psi'\rangle| = |\langle\Phi|\Psi\rangle| \tag{3}$$

注意,这里并未要求$\langle\Phi'|\Psi'\rangle=\langle\Phi|\Psi\rangle$(内积不变,这是幺正变换的特征),而只是要求内积的绝对值不变. 维格纳(Wigner)曾经证明,对称性变换局限于幺正变换(unitary transformation)与反幺正变换(antiunitary transformation)两类. 下面讨论这个问题.

考察任意态矢量

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n|u_n\rangle \tag{4}$$

对体系施以对称性变换U后,

$$|\Psi'\rangle = \sum_n c_n'|u_n'\rangle \tag{5}$$

其中

$$c_n = \langle u_n|\Psi\rangle \tag{6}$$

$$c_n' = \langle u_n'|\Psi'\rangle \tag{7}$$

根据(3)式,可得

$$|c_n'| = |c_n| \tag{8}$$

我们讨论两种可能:$c_n'=c_ne^{i\delta_n}$,$c_n'=c_n^*e^{i\delta_n}$,式中δ_n为任意实位相角.

① $c_n'=c_ne^{i\delta_n}$

这时(5)式变成

$$|\Psi'\rangle = \sum_n c_ne^{i\delta_n}|u_n'\rangle$$

把$e^{i\delta_n}$吸收到$|u_n'\rangle$中去,就得到

$$|\Psi'\rangle = \sum_n c_n|u_n'\rangle \tag{9}$$

对于另一态矢量

$$|\Phi\rangle = \sum_n d_n|u_n\rangle \tag{10}$$

仿照上面相同的步骤,同样可得到

$$|\Phi'\rangle = \sum_n d_n|u_n'\rangle \tag{11}$$

设

$$|\xi\rangle = \alpha|\Psi\rangle + \beta|\Phi\rangle \tag{12}$$

将(4)式和(10)式代入上式得

$$|\xi\rangle = \sum_n (\alpha c_n + \beta d_n)|u_n\rangle \tag{13}$$

同样
$$|\xi'\rangle = \sum_n (\alpha c_n + \beta d_n)|u_n'\rangle$$
$$= \alpha|\Psi'\rangle + \beta|\Phi'\rangle \tag{14}$$

注意到 $|\Psi'\rangle = U|\Psi\rangle$, $|\Phi'\rangle = U|\Phi\rangle$, $|\xi'\rangle = U|\xi\rangle$

由(12)式和(14)式可得

$$U(\alpha|\Psi\rangle + \beta|\Phi\rangle) = \alpha U|\Psi\rangle + \beta U|\Phi\rangle. \tag{15}$$

上式是线性变换的特征,可见 U 是线性算符.

又由(9)式和(11)式作标积得

$$\langle\Psi'|\Phi'\rangle = \sum_n c_n^* d_n = \langle\Psi|\Phi\rangle \tag{16}$$

上式表示保持两矢量标积不变,因而对称性变换 U 应是幺正变换,算符 U 是幺正算符.

② $c_n' = c_n^* e^{i\delta_n}$

与上面相同的步骤可得到

$$|\Psi'\rangle = \sum_n c_n^* |u_n'\rangle \tag{17}$$

$$|\Phi'\rangle = \sum_n d_n^* |u_n'\rangle \tag{18}$$

$$U(\alpha|\Psi\rangle + \beta|\Phi\rangle) = \alpha^* U|\Psi\rangle + \beta^* U|\Phi\rangle \tag{19}$$

$$\langle\Psi'|\Phi'\rangle = \sum_n c_n d_n^* = \langle\Phi|\Psi\rangle = \langle\Psi|\Phi\rangle^* \tag{20}$$

(19)式表明,对称变换 U 是反线性变换;(20)式表明,U 又是反幺正变换.

实际上我们常常涉及的对称变换,除了时间反演是反幺正变换外,其余均属幺正变换.例如体系的空间平移或转动都是幺正变换.此外,还有与体系的动力学对称性相联系的幺正变换,与同位旋(SU_2)不变性和强子结构的 SU_3 对称性相联系幺正变换.在表象理论中,不同表象或绘景之间也是通过幺正变换相联系的.有关幺正变换的性质,已在第五章§2中讨论过.

(2) 薛定谔方程的对称性

现在我们来研究描述微观粒子运动规律的薛定谔方程的对称

性.

薛定谔方程为

$$i\hbar\frac{\partial|\Psi\rangle}{\partial t}=H|\Psi\rangle \tag{21}$$

设体系具有某种对称性. 在对称变换 U 下,态 $|\Psi\rangle$ 变为 $|\Psi'\rangle$,即

$$|\Psi\rightarrow|\Psi'\rangle=U|\Psi\rangle \tag{22}$$

或

$$|\Psi\rangle=U^{-1}|\Psi'\rangle \tag{22'}$$

式中 U^{-1} 是 U 的逆变换. 在变换 U 下体系具有对称性意味着 $|\Psi\rangle$ 与 $|\Psi'\rangle$ 满足相同的运动方程,即如果 $|\Psi\rangle$ 是体系的可能态,则 $|\Psi'\rangle$ 也是体系的可能态,即 $|\Psi\rangle$ 满足薛定谔方程(21)式,则 $|\Psi'\rangle$ 也满足薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial|\Psi'\rangle}{\partial t}=H|\Psi'\rangle \tag{23}$$

将(22)式代入上式得

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U|\Psi\rangle=HU|\Psi\rangle \tag{24}$$

两边乘以 U^{-1},得

$$i\hbar\frac{\partial|\Psi\rangle}{\partial t}=U^{-1}HU|\Psi\rangle \tag{25}$$

与(21)式比较,得到重要的结果

$$H=U^{-1}HU \tag{26}$$

即

$$UH=HU \tag{27}$$

或

$$[H,U]=0 \tag{28}$$

(21)式和(23)式表明,变换前后的态 $|\Psi\rangle$ 和 $|\Psi'\rangle$ 满足同样的薛定谔方程. 即在对称变换 U 下,体系的薛定谔方程保持不变,我们就说,体系的薛定谔方程对于对称变换 U 具有不变性或对称性.

(28)式是一个十分重要的关系式,它是体系的哈密顿量在对称变换 U 下具有不变性的数学表示,换句话说,就是体系的薛定谔方程在对称变换 U 下具有不变性的数学表示,它根源于体系具

有某种对称性.因此,它也可以说是体系具有某种对称性的数学表示.

(3) 对称变换保持时间演化算符不变

假定体系的动力学规律在对称变换 U 下是不变的,这意味着跃迁几率

$$w_{i\to f} = w_{i'\to f'} \tag{29}$$

其中态 $|i'\rangle$ 和 $|f'\rangle$ 分别由态 $|i\rangle$ 和 $|f\rangle$ 借助于对称变换 U 产生,即

$$|i'\rangle = U|i\rangle, \quad |f'\rangle = U|f\rangle \tag{30}$$

若 $t=t_0$ 时体系处于特定的定态 $|i\rangle$,后一时刻 t 时态为 $|\Phi(t)\rangle = U(t,t_0)|i\rangle$,则在时间 $t-t_0$ 内跃迁到特定末态 $|f\rangle$ 的几率为

$$\begin{aligned} w_{i\to f} &= |\langle f|\Phi(t)\rangle|^2 \\ &= |\langle f|U(t,t_0)|i\rangle|^2 \end{aligned} \tag{31}$$

式中 $U(t,t_0)$ 为时间演化算符.注意到(30)式,则有

$$\begin{aligned} w_{i'\to f'} &= |\langle f'|U(t,t_0)|i'\rangle|^2 \\ &= |\langle f|U^+ U(t,t_0)U|i\rangle|^2 \end{aligned} \tag{32}$$

比较(31)式和(32)式,并注意(29)式,则得

$$U^+ U(t,t_0)U = U(t,t_0) \tag{33}$$

如果限于幺正变换,则上式变成

$$[U(t,t_0),U] = 0 \tag{34}$$

即时间演化算符 $U(t,t_0)$ 与对称变换算符 U 对易,我们就说对称变换保持时间演化算符不变.

值得注意,(28)式与(34)式相似.我们知道,在第五章 § 3 中,积分方程(5)式连同(2)式是与薛定谔方程(1)式等价的,时间演化算符的作用与哈密顿算符的作用相当.因此,对称变换既可保持哈密顿量的不变性,也应该保持时间演化算符的不变性.

由于 U 与 $U(t,t_0)$ 对易,所以,如果 $|\Phi(t)\rangle$ 是动力学方程的解,那么,$U|\Phi(t)\rangle$ 也是可能的解.事实上,

$$|\Phi(t)\rangle = U(t,t_0)|\Phi(t_0)\rangle \tag{35}$$

$$\begin{aligned} |\Phi'(t)\rangle &= U|\Phi(t)\rangle = UU(t,t_0)|\Phi(t_0)\rangle \\ &= U(t,t_0)U|\Phi(t_0)\rangle \end{aligned}$$

$$=U(t,t_0)\,|\Phi'(t_0)\rangle \tag{36}$$

(4) 对称变换保持体系的哈密顿量不变

我们也可以通过积分方程

$$U(t,t_0) = 1 + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} HU(t',t_0)dt' \tag{37}$$

用另一种方法来证明，哈密顿量在对称变换 U 下具有不变性. 为此，用 U^+左乘及 U 右乘上式两边，并注意 U 的幺正性，得

$$U^+ U(t,t_0)U = 1 + \frac{1}{i\hbar}\int_{t_0}^{t} U^+ HU(t',t_0)Udt' \tag{38}$$

注意到(33)式，可知(37)式与(38)式左边相等，因而两式右边亦相等，于是有

$$\int_{t_0}^{t} HU(t',t_0)dt' = \int_{t_0}^{t} U^+ HU(t',t_0)Udt'$$

又由(34)式可知 U 与 $U(t,t_0)$对易，因此上式成为

$$\int_{t_0}^{t} HU(t',t_0)dt' = \int_{t_0}^{t} U^+ HUU(t',t_0)dt' \tag{39}$$

由于 t_0 和 t 是任意的，于是得到

$$H = U^+ HU \tag{40}$$

即

$$[H,U] = 0 \tag{41}$$

与(28)式一致.

3. 守恒定律与对称性的关系

由第五章 § 3(15)式和(16)式可知

$$[H,A] = 0 \tag{42}$$

就是$\frac{\mathrm{d}\langle A\rangle}{\mathrm{d}t}=0$，这时力学量平均值$\langle A\rangle$不随时间变化. 于是，力学量 A 是一个守恒量. 对比(28)式(或(41)式)与(42)式可见，U 应该确定一个守恒量. 当我们说到守恒量时，指的是物理上的可观察量，而可观察量必须用厄密算符来表示. 但是，我们仅仅知道 U 是幺正的. 如果碰巧 U 既是幺正的，又是厄密的(例如空间反射变换 I)，则 U 表示的力学量就是守恒量. 如果 U 只是幺正的，但不是厄密的(例如空间平移、空间转动等)，则要找到一个与 U 有关的厄

密算符作为守恒的可观察量. 例如，设 U 为某种连续变换，此时可考虑无穷小变换 ε，令

$$U = 1 - i\varepsilon F \tag{43}$$

根据 U 的幺正性，可得

$$\begin{aligned} 1 &= U^+ U = (1 + i\varepsilon F^+)(1 - i\varepsilon F) \\ &= 1 - i\varepsilon(F - F^+) + 0(\varepsilon^2) \end{aligned}$$

由此得到

$$F^+ = F \tag{44}$$

即 F 是一个厄密算符. 将(43)式代入(41)式(或(28)式)容易证明

$$[H, F] = 0 \tag{45}$$

可见 F 是一个守恒量，它与体系在对称变换 U 下的对称性相联系.

由上面的讨论我们看到，由体系的某种对称性(体系的哈密顿量具有不变性)导致某一守恒定律的存在，即守恒定律导源于体系的对称性. 但是反之不一定对. 上一小节我们证明过，量子力学体系的所有对称性，都与一个幺正变换或反幺正变换相联系. 对于幺正变换的不变性，有守恒定律与之联系，但对反幺正变换的不变性，并不对应守恒律，例如时间反演不变性并无相应的守恒律.

值得注意，量子力学中守恒量的意义与经典力学中的守恒量有所不同. 不难证明，在体系的任一态下守恒量 F 的平均值 $\langle F\rangle$ 不随时间改变，它的测值几率分布也不随时间而变. 但与经典力学不同，量子力学中守恒量并不一定具有确定的(不随时间变化)的值，这要视初始条件而定. 若初始时刻，守恒量取确定值(体系处于守恒量 F 的本征态)，则以后将保持取该确定值；但若初始时刻 F 并不取确定值，则以后也不取确定值，而只能保持其测值几率分布及平均值不随时间改变.

§2 对称性变换群

体系的对称性变换的集合往往具有数学上群(group)的性质. 群论(group theory)是研究对称性的适当的数学工具.

我们知道，在经典力学中，微积分(calculus)是适当的工具. 历史上，牛顿定律的发现和微积分的发明几乎出现在十七世纪的同一时期. 群论的思想虽然早在1810年便进入了数学中，但是，对对称性研究起关键作用的群表示理论(theory of group representations)却直到1920年才被发展起来. 1925年量子力学建立以后，M. Von. Laue首先认识到群论可以作为量子力学处理问题的一个自然的工具. 在维格纳(1931年)，韦耳(1928年)等人的经典著作中也很早认识到量子力学中对称性的意义，并开始利用群论方法来处理原子结构和原子光谱问题. 人们发现几乎所有关于原子光谱的规律(*Laporte* 关于宇称守恒的定律，量子论中的矢量模型，光跃迁的偶极辐射选择定则等)均可以根据量子力学从体系的对称性考虑得出. 现在，群论方法已深入到近代物理各个领域之中.

1. 对称性变换群

我们首先举例说明，对称性变换的集合构成数学意义上的一个群.

[例1] 空间反射群由空间反射变换 I 和恒等变换 E 两个对称性操作组成. 空间反射变换 I 是

$$r' = Ir = -r \tag{1}$$

因而 $$I^2 r = I(Ir) = I(-r) = r$$

即两次连续反射使体系还原，这相当于使体系不变的恒等变换 E，故

$$I^2 = E \tag{2}$$

E 就是恒等元或单位元. 因此有

$$\left.\begin{aligned} IE &= EI = I \\ I^2 &= E \\ I^3 &= II^2 = IE = I \\ I^4 &= II^3 = II = E \end{aligned}\right\} \tag{3}$$

以上诸式表明反射操作和恒等操作对乘法是封闭的，且是可对易的.

由(2)式得出

$$I^{-1} = I = I^{+} \tag{4}$$

即逆元是存在的，且逆变换就是反射变换自身．此外，乘法的结合律成立是显然的．由此可见，空间反射操作和恒等操作两个元素构成一个群，称为空间反射群．它是二阶分立群，也是阿贝尔群．

［**例 2**］时空平移变换的集合构成时空平移变换群．以空间平移变换为例．令 $D(\boldsymbol{\alpha})$ 代表空间平移变换，其定义为

$$D(\boldsymbol{a})\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r} + \boldsymbol{a} \tag{5}$$

即 $D(\boldsymbol{\alpha})$ 代表把坐标 $\boldsymbol{r}$ 平移 $\boldsymbol{a}$ 的操作．

(1) $D(\boldsymbol{a})$ 对乘法是封闭的．设

$$D(\boldsymbol{a}_1)\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r} + \boldsymbol{a}_1$$

$$D(\boldsymbol{a}_2)\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r} + \boldsymbol{a}_2$$

则 $D(\boldsymbol{a}_2)D(\boldsymbol{a}_1)\boldsymbol{r} = D(\boldsymbol{a}_2)(\boldsymbol{r} + \boldsymbol{a}_1) = \boldsymbol{r} + \boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2$，

因为连续两次平移相当于一次平移 $\boldsymbol{a}_3=\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2$，故

$$D(\boldsymbol{a}_3)\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r} + \boldsymbol{a}_3 = \boldsymbol{r} + \boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2$$

对比以上两式可得

$$D(\boldsymbol{a}_3) = D(\boldsymbol{a}_2)D(\boldsymbol{a}_1) \tag{6}$$

这就是 $D(\boldsymbol{a})$ 对乘法的封闭性．显然，平移的次序是无关紧要的，即

$$D(\boldsymbol{a}_1)D(\boldsymbol{a}_2) = D(\boldsymbol{a}_2)D(\boldsymbol{a}_1)$$

(2) 存在恒等变换．令 $\boldsymbol{a}=0$ 即得

$$D(0)\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r} \tag{7}$$

故 $D(0)$ 就是恒等元（单位元）．

(3) 存在逆元 $D^{-1}(\boldsymbol{a})$．因为

$$\begin{aligned} D(-\boldsymbol{a})D(\boldsymbol{a})\boldsymbol{r} &= D(-\boldsymbol{a})(\boldsymbol{r} + \boldsymbol{a}) \\ &= (\boldsymbol{r} + \boldsymbol{a}) + (-\boldsymbol{a}) = \boldsymbol{r} \end{aligned}$$

故

$$D(-\boldsymbol{a})D(\boldsymbol{a}) = E \tag{8}$$

对比逆元的定义

$$D^{-1}(\boldsymbol{a})D(\boldsymbol{a}) = E$$

可见，$D(\boldsymbol{a})$ 的逆变换 $D(-\boldsymbol{a})$ 就是 $D^{-1}(\boldsymbol{a})$，即 $D^{-1}(\boldsymbol{a}) = D(-\boldsymbol{a})$．

(4) 乘法满足结合律是显然的，不再证明．

可见，空间平移变换的集合构成空间平移群，它是阿贝尔群．

空间平移群与空间反射群有一原则区别，前者不是有限群，也不是分立群. 这是因为群元素 $D(\alpha)$是连续变化的三个参数 α_1,α_2 和 α_3 的函数($\boldsymbol{\alpha}=\boldsymbol{i}\alpha_1+\boldsymbol{j}\alpha_2+\boldsymbol{k}\alpha_3$)，且群元素有无限多个. 空间平移变换群是连续群.

[例 3] 空间转动变换的集合构成空间转动群. 参阅第一篇第四章 § 4，不再赘述. 空间转动群也是连续群.

一般说来，体系的对称性变换的集合，往往具有下列性质：

(1) 任何两个变换依次作用的结果，也是体系的一个对称性变换(乘法的封闭性)；

(2) 对称性变换中总是包含有恒等变换(即单位元)；

(3) 集合中任一个变换都有逆变换，也属于此集合；

(4) "乘法"服从结合律.

具有以上性质的对称性变换集合构成体系的一个对称性变换群.

量子力学中通常涉及的特殊的连续变换群都是李氏变换群.

2. 群表示的无穷小算符

让我们考虑对称性变换群 $G=\{g_0,g_1,g_2,\cdots,g_\alpha,\cdots\}$，对于每一对称性变换 g_α，在希尔伯特空间中将有一幺正算符 $U(\alpha)$与之对应，使得如果有

$$g_\beta g_\alpha = g_\gamma$$

则对应算符存在如下关系.

$$U(\gamma) = U(\beta)U(\alpha) \tag{9}$$

这就是说，算符 U 的集合在希尔伯特空间中构成群 G 的表示.

现在假定 G 是连续群，即参数连续变化，特别是 $\lim\limits_{\alpha\to 0} g_\alpha=g_0$ 是恒等元. 为了找到 $U(\alpha)$，首先找群 G 在希尔伯特空间中的无穷小算符. 对无穷小变换，参数用 $\delta\alpha$ 表示，$|\delta\alpha|\ll 1$，使得 $U(\delta\alpha)$与恒等算符相差无穷小，即

$$U(\delta\alpha) = 1 - i\delta\alpha\mathscr{G}, \qquad |\delta\alpha| \ll 1 \tag{10}$$

由于 $U(\delta\alpha)$是幺正的，故 $\mathscr{G}$ 是厄密的，它就是群 G 的无穷小算符. 如果参数有 n 个，则可写成

$$U(\delta\alpha_1, \delta\alpha_2, \cdots \delta\alpha_n) = 1 - i\sum_{j=1}^{n}\delta\alpha_j \mathscr{G}_j \tag{11}$$

如果参数 α 是有限的，我们可用 α/N 表示无穷小参数，其中 N 是很大的数. 有限变换 g_α 可由连续施行无穷小变换逐步迫近而得到，即

$$g_\alpha = \lim_{N\to\infty}(g_{\delta\alpha})^N = \lim_{N\to\infty}(g_{\alpha/N})^N$$

于是由(10)式可得

$$U(\alpha) = \lim_{N\to\infty}(1 - i\frac{\alpha}{N}\mathscr{G})^N = e^{-i\alpha\mathscr{G}} \tag{12}$$

如果有 n 个参数，则

$$U(\alpha_1, \alpha_2, \cdots \alpha_n) = \exp(-i\sum_{j=1}^{n}\alpha_j \mathscr{G}_j) \tag{13}$$

当展开指数算符时必须留意，因为各个 $\mathscr{G}_j$ 不一定对易.

由(11)式和(13)式可知，一旦知道了 $\mathscr{G}_j$，就确定了幺正算符 $U(\alpha)$. 因此，群 G 的无穷小算符是 $\mathscr{G}_j$.

为了确定无穷小算符 $\mathscr{G}_j$，取某物理量 A_j 并考察它在无穷小变换下的变换. 根据第五章 § 2(10)式

$$A' = UAU^+$$

将 A' 写成 $A+\delta A$，并注意(11)式，则上式可表为

$$A + \delta A = (1 - i\sum_j \delta\alpha_j \mathscr{G}_j)A(1 + i\sum_j \delta\alpha_j \mathscr{G}_j)$$

$$= A + i\sum_j [A, \mathscr{G}_j]\delta\alpha_j, \quad j = 1, 2, \cdots\cdots n$$

即

$$\delta A = i\sum_j [A, \mathscr{G}_j]\delta\alpha_j$$

或

$$[\mathscr{G}_j, A] = i\frac{\delta A}{\delta\alpha_j}, \quad j = 1, 2, \cdots\cdots n \tag{14}$$

上式表明，知道了物理量 A 随参数变化的规律，就可以决定无穷小算符(至多相差一个常数因子).

3. 对称性群与守恒律

上节我们介绍了守恒定律与对称性的关系，守恒定律导源于体系的对称性. 从群论的观点来看，对称性群的元素 g_α 在希尔伯

特空间的表示 $U(a)$ 确定运动恒量. 这是因为上节讨论的对称变换算符 U 一般就是对称性群 G 的元素 g_a 在希尔伯特空间的表示 $U(a)$，对应于 § 1(28)式就有

$$[H, U(a)] = 0 \tag{15}$$

可见，$U(a)$ 与 H 对易，因此，$U(a)$ 应该确定一个守恒量. 对于连续群，我们有无穷小算符 $\mathscr{G}$（见(10)式）. 将(10)式代入上式，便得到

$$[H, \mathscr{G}] = 0 \tag{16}$$

即群表示的无穷小算符与 H 对易. 因为 $\mathscr{G}$ 是厄密的，我们可以把无穷小算符 $\mathscr{G}$ 作为守恒的可观察量. 如果对称性群有几个无穷小算符，那么，每一个无穷小算符都产生一个独立的守恒量，这是因为在(13)式中我们可以保留一个参数不为零而其余参数为零，便得到相应的一个守恒量. 当我们轮流取其中某一参数不为零而其余参数为零时，便得到对应的守恒量. 但是，应该指出，一般地，不是所有的运动恒量 $\mathscr{G}_1, \mathscr{G}_2, \cdots, \mathscr{G}_n$ 都能同时测量，因为它们不一定对易. 这样一来，在 G 下的对称性并不能得到 n 个"好量子数"("good quantum number"). 好量子数的个数决定于群的秩(rank) r，即同时对易的无穷小算符的数目. 例如，在旋转对称性情形下，无穷小生成元对应于角动量的各个分量. 这三个分量都是运动恒量，但 $r=1$，它们当中的一个与另外两个不对易. 因此，这种不变性只能提供一个好量子数，比如说是第三分量的本征值.

但是，我们知道，对于李群的每一个确定的表示，存在一定的算符，它们与无穷小算符的关系是非线性的，并与所有无穷小算符对易. 换言之，存在群的不变量(invariant). 由于每一个无穷小算符都与哈密顿量对易，因此，这些不变量显然与哈密顿量对易. 由此可见，这些不变量都是运动恒量，所以这些不变量的本征值可以作为附加的"好"量子数. 在上面所举旋转对称性的例子中，每一个表示仅有一个不变量，就是熟知的卡塞米尔算符 $J^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2$，其本征值为 $j(j+1)\hbar^2$. 因此，量子数 j 可以与 j_3 一起作为"好"的守恒的量子数. 这样，H，J_3 和 J^2 都是对易的可观察量.

由于无穷小算符 $\mathscr{G}$ 是运动恒量，因此我们有：

(1) 如果在某一瞬时 t_0，$\mathscr{G}$ 的期望值是 $\langle\mathscr{G}\rangle$，那么，在任何瞬时，它的期望值仍是 $\langle\mathscr{G}\rangle$. 事实上，

$$\langle\mathscr{G}\rangle = \langle\Phi(t_0)|\mathscr{G}|\Phi(t_0)\rangle$$

$$\begin{aligned}\langle\mathscr{G}\rangle &= \langle\Phi(t)|\mathscr{G}|\Phi(t)\rangle \\ &= \langle\Phi(t_0)|U^+(t,t_0)\mathscr{G}U(t,t_0)|\Phi(t_0)\rangle \\ &= \langle\Phi(t_0)|U^+(t,t_0)U(t,t_0)\mathscr{G}|\Phi(t_0)\rangle \\ &= \langle\Phi(t_0)|\mathscr{G}|\Phi(t_0)\rangle = \langle\mathscr{G}\rangle \end{aligned} \tag{17}$$

其中用了 $[U(t,t_0),\mathscr{G}]=0$，这是因为 $[U(t,t_0),U(a)]=0$ 之故（见§1(34)式）.

(2) 如果在某一瞬时 t_0，态矢量 $|\Phi(t_0)\rangle$ 是 $\mathscr{G}$ 属于本征值 γ 的本征态，那么，在任意瞬时，$|\Phi(t)\rangle$ 仍是 $\mathscr{G}$ 属于相同本征值 γ 的本征态. 事实上，

$$\mathscr{G}|\Phi(t_0)\rangle = \gamma|\Phi(t_0)\rangle$$

$$\begin{aligned}\mathscr{G}|\Phi(t)\rangle &= \mathscr{G}U(t,t_0)|\Phi(t_0)\rangle \\ &= U(t,t_0)\mathscr{G}|\Phi(t_0)\rangle \\ &= \gamma U(t,t_0)|\Phi(t_0)\rangle \\ &= \gamma|\Phi(t)\rangle \end{aligned} \tag{19}$$

4. 分立群的情形

对于分立群，无穷小算符没有意义，而必须分别考虑每一个群元素. 我们把分立群的元素 g_a 的表示表为

$$U(a) = e^{-i\mathscr{G}_a} \quad a = 0,1,2,\cdots,m \tag{20}$$

式中 $\mathscr{G}_a$ 是厄密的. 我们把 $\mathscr{G}_a$ 同守恒的可观察量联系起来. 但是，在许多重要的情形下，例如反射对称性，情况更为简单，群由两个元素组成，参阅本节例 1. 与(4)式对应的希尔伯特空间中的表示为

$$U^{-1}(I) = U(I) = U^+(I) \tag{21}$$

上式表明，$U(I)$ 不仅是幺正的，而且又是厄密的，因而 U 是可观察量，U 守恒就意味着相应的可观察量守恒，即在空间反射对称的情形下，宇称是守恒量.

§3 空间平移不变性与动量守恒

从现在开始，我们把注意力集中到时空对称性，包括连续的和分立的对称变换，然后讨论一些内禀的对称性群.

本节讨论空间平移与动量守恒之间的联系.

1. 空间平移

空间平移变换为

$$\boldsymbol{r} \xrightarrow{g_a} \boldsymbol{r} + \boldsymbol{a} \tag{1}$$

式中 $\boldsymbol{a}$ 与 $\boldsymbol{r}$ 无关. 用分量表示为

$$x \to x + a_1, \quad y \to y + a_2, \quad z \to z + a_3 \tag{2}$$

对于无穷小变换，a_j 近于零(near zero)，我们用 δa_j 记之. 由 §2 例 2 我们知道，空间平移变换的集合构成空间平移群. 它是阿贝尔群. 这个群具有三个实参数，即 $\boldsymbol{a}=(a_1,a_2,a_3)$，对应于三个坐标轴方向的位移. 群的组合律

$$g_a g_{a'} = g_{a''}$$

用参数表示为

$$a''_j = a_j + a'_j, \quad j = 1,2,3 \tag{3}$$

群的单位元具有参数(0,0,0).

2. 群表示的无穷小算符

现在我们来寻找群元素在希尔伯特空间中的表示. 为此目的，我们利用 §2(14)式，先寻找无穷小算符. 为了确定，我们考虑具有自旋的点粒子的情形. 设可观察量 A_j 由笛卡儿坐标算符 q_1,q_2,q_3 和它们的正则共轭动量 p_1,p_2,p_3 以及自旋算符 S_1,S_2,S_3 组成. 由无穷小平移 δa_j 引起的无穷小改变是

$$\left.\begin{aligned} \delta q_j &= - \delta a_j \\ \delta p_j &= 0 \\ \delta S_j &= 0, \end{aligned}\right\} \quad j = 1,2,3 \tag{4}$$

自旋算符保持不变是由于它们是内禀可观察量，与坐标无关.

为了简单起见，取 $\delta q_2=\delta q_3=0$ 的情形，即平移发生在 x 方向

上. 利用 § 2(14)式便得

$$[\mathscr{G}_1,q_1]=-i,\quad [\mathscr{G}_1,q_2]=[\mathscr{G}_1,q_3]=0$$
$$[\mathscr{G}_1,p_j]=0,\quad [\mathscr{G}_1,S_j]=0 \tag{5}$$

式中 $\mathscr{G}_1$ 是对应于无穷小变换 $x\to x+\delta a_1$ 的无穷小算符.

除了任意常数外，这些方程唯一地确定 $\mathscr{G}_1$. 的确，如果取

$$\mathscr{G}_1=\frac{1}{\hbar}p_1 \tag{6a}$$

(其中 p_1 是动量算符的 x 分量)我们就发现，上面的关系(5)式满足基本算符代数关系，即满足海森堡对易关系. 同理可得

$$\mathscr{G}_2=\frac{1}{\hbar}p_2 \tag{6b}$$

$$\mathscr{G}_3=\frac{1}{\hbar}p_3 \tag{6c}$$

上面三个等式告诉我们，除去因子$\frac{1}{\hbar}$外，对应于空间平移的无穷小算符，在希尔伯特空间中由动量算符的分量表示.

根据 § 2(13)式，我们可以写出任意平移在希尔伯特空间中的表示. 将(6a)、(6b)、(6c)式代入 § 2(13)式得到

$$U(\boldsymbol{a})=\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{p}\right] \tag{7}$$

由于动量算符是厄密算符，故 $U(\boldsymbol{a})$是幺正算符.

根据 § 1(1)式，我们得到态的变换规律：

$$|\Psi'(t)\rangle=\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{p}\right]|\Psi(t)\rangle \tag{8}$$

如果我们采用坐标表象，态由薛定谔波函数 $\psi(\boldsymbol{r})$表示，动量算符由 $\boldsymbol{p}=\frac{\hbar}{i}\nabla$表示，因而有

$$\psi'(\boldsymbol{r})=\exp(-\boldsymbol{a}\cdot\nabla)\psi(\boldsymbol{r}) \tag{9}$$

将指数展开，我们有

$$\psi'(\boldsymbol{r})=\{1-\boldsymbol{a}\cdot\nabla+\frac{1}{2}a^2\nabla^2-\cdots\}\psi(\boldsymbol{r})=\psi'(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{a}) \tag{10}$$

由此可见，算符(7)式可诠释为位移算符(displacement operator).

3. 平移不变性与动量守恒定律

我们假定空间是均匀的(homogenerous),即空间各点是等价的. 这个假定意味着封闭的物理体系具有平移不变性. 根据 § 2 (15)、(16)两式和本节(6)式,于是得到

$$\left.\begin{aligned}&[H, U(a_j)] = 0\\&[H, \mathscr{G}_j] = 0\\&[H, p_j] = 0\end{aligned}\right\} \qquad j = 1,2,3 \tag{11}$$

可见,动量的分量是运动恒量,它们是守恒的可观察量.

这样一来,作为空间平移不变性的结果,我们得到了三个独立的守恒定律. 因为空间平移群是阿贝尔群,全部元素,因而所有三个无穷小算符都彼此对易,态能够同时地用 p_1, p_2, p_3 的本征值标记. 动量的全部分量都是"好"量子数. 此外,平移群的表示具有不变量,即卡塞米尔算符,它是无穷小算符的平方和 $\mathscr{G}_1^2+\mathscr{G}_2^2+\mathscr{G}_3^2$. 所以,动量的大小 $p^2=p_1^2+p_2^2+p_3^2$ 也是一个好量子数.

最后我们指出,虽然平移不变性导致动量守恒,但并不意味着这时体系一定处于动量的本征态中. 体系既可处于动量的本征态中(单色平面波),也可处于动量本征态的迭加态中,波包就是后一情形的例子.

§ 4　时间平移不变性与能量守恒

时间平移变换是

$$t \xrightarrow{g_a} t + a \tag{1}$$

其中 a 与 t 无关.

对于无穷小的时间平移,我们用 δt 记参数.

任意大小的各个时间的平移构成连续的一个参数的阿贝尔群. 群的组合律 $g_a g_{a'} = g_{a''}$ 用参数表示为

$$a'' = a + a' \tag{2}$$

其中 a 是实数. 群的单位元是 $a=0$.

现在我们再考虑具有自旋的点粒子,并要找寻时间平移群在

希尔伯特空间中的表示.如果体系是封闭的,则由无穷小时间平移引起的改变为①

$$
\left.\begin{aligned}
\delta q_j &= -\dot{q}_j \delta t \\
\delta p_j &= -\dot{p}_j \delta t \\
\delta S_j &= -\dot{S}_j \delta t
\end{aligned}\right\}, \quad j = 1,2,3 \tag{3}
$$

由 § 2(14)式我们得到

$$
\left.\begin{aligned}
[\mathscr{G}, q_j] &= -i\dot{q}_j \\
[\mathscr{G}, p_j] &= -i\dot{p}_j \\
[\mathscr{G}, S_j] &= -i\dot{S}_j
\end{aligned}\right\}, \quad j = 1,2,3 \tag{4}
$$

考虑到海森堡运动方程,上述方程组的解除任意可加性常数外是唯一的,而这个常数我们可取它为零.因此,我们有

$$
\mathscr{G} = \frac{-1}{\hbar} H \tag{5}
$$

由此可见,可以取体系的哈密顿量 H 作为时间平移群的无穷小算符.

由无穷小算符可以求出时间平移群的表示为

$$
U(a) = e^{\frac{i}{\hbar} aH} \tag{6}
$$

在时间平移变换下,我们有

$$
|\Psi'(t)\rangle = e^{\frac{i}{\hbar} aH} |\Psi(t)\rangle = |\Psi(t-a)\rangle \tag{7}
$$

我们假定,时间是均匀的,这就意味着对封闭系而言,时间平移具有不变性.于是,我们又可得到

$$
\left.\begin{aligned}
[H, U(a)] &= 0 \\
[H, \mathscr{G}] &= 0 \\
[H, H] &= 0
\end{aligned}\right\} \tag{8}
$$

式中 H 是体系与时间无关的哈密顿量.由此我们得到能量守恒定律,并且能量守恒是时间平移不变性的结果.封闭系或外场与时间无关的体系都具有这样的性质.由于 H 不显含时间,它就是能量算符,故时间均匀性,即时间平移不变性也就意味着能量守恒.

---

① 参阅 Roman, Advanced Quantum Theory, P. 8, (1-12)式.

通常的原子和分子体系在不受含时微扰作用时，由于 H 与时间无关，从而能量守恒. 当然，能量守恒并不意味着体系一定处于具有确定能量的本征态中，它也可能处于能量本征态的迭加态中. 当体系受含时微扰作用时，时间平移不变性受到破坏，体系能量不再守恒，体系将在各能量本征态之间跃迁.

§5　空间转动不变性与角动量守恒

1. 空间转动群

在三维欧几里得空间中，旋转由下式给出

$$\boldsymbol{r} \xrightarrow{g_\alpha} R(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)\boldsymbol{r} \tag{1}$$

其中我们选 $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ 作为旋转轴的“矢量”方向，其大小 $|\alpha| = \sqrt{\alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2}$ 是旋转角，$|\alpha| \leqslant \pi$. 绕 z 轴转过 α 角表示为 $\boldsymbol{\alpha} = (0, 0, \alpha)$，等等.

(1)式中 $R(\boldsymbol{\alpha})$ 是一个旋转矩阵. 为了简单起见，我们先考虑绕某一确定的坐标轴（例如 z 轴）的旋转，设转动角为 α，旋转矩阵记为 $R_k(\alpha)$，则有

$$R_k(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha & 0 \\ -\sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{2}$$

这个矩阵是正交的，即它满足

$$R\tilde{R} = \tilde{R}R = E \tag{3}$$

式中 $\tilde{R}$ 为 R 的转置矩阵，E 为单位矩阵. R 的行列式为

$$\det R = +1 \tag{4}$$

我们知道，所有 3×3 转动矩阵（对应于不同的转角 α）的集合构成一个一维阿贝尔群，称为轴转动群，记为 SO_2.

对于无穷小转动，用 $\mathrm{d}\alpha$ 记之. 于是，无穷小转动可表为

$$R_k(\mathrm{d}\alpha)=\begin{pmatrix}1 & \mathrm{d}\alpha & 0\\ -\mathrm{d}\alpha & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

$$=E+d\alpha I_3 \tag{5}$$

式中 E 是 3×3 单位矩阵，并且

$$I_3=\begin{pmatrix}0 & 1 & 0\\ -1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix} \tag{6}$$

对于绕 x 轴和 y 轴的转动，同理可得

$$I_1=\begin{pmatrix}0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1\\ 0 & -1 & 0\end{pmatrix} \tag{7}$$

$$I_2=\begin{pmatrix}0 & 0 & -1\\ 0 & 0 & 0\\ 1 & 0 & 0\end{pmatrix} \tag{8}$$

直接计算全部对易关系可以建立李代数：

$$[I_j,I_k]=-\varepsilon_{jkl}I_l,\quad j,k,l=1,2,3 \tag{9}$$

式中 ε_{jkl}是完全反对称的 Levi-Civita 记号：

$$\varepsilon_{jkl}=\begin{cases}+1, & \text{当}(jkl)\text{是}(123)\text{的偶置换}\\ -1, & \text{当}(jkl)\text{是}(123)\text{的奇置换}\\ 0, & \text{当}(jkl)\text{中有两个指标相同}\end{cases} \tag{10}$$

对于绕任意轴的无穷小旋转，旋转矩阵为

$$R(\mathrm{d}\alpha_1,\mathrm{d}\alpha_2,\mathrm{d}\alpha_3)=E+\mathrm{d}\alpha_1I_1+\mathrm{d}\alpha_2I_2+\mathrm{d}\alpha_3I_3$$

$$=E+\sum_{j=1}^{3}\mathrm{d}\alpha_jI_j \tag{11}$$

我们知道，绕任意轴转过任意角度的各个旋转构成一个三维空间转动群，记为 SO_3，它是非阿贝尔群，因为绕不同轴的旋转不能对易. 此群有三个实参数. 例如 $\alpha=(\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3)$，也可以用欧拉角 (α,β,γ)表示. 对于群的三个实参数，存在三个无穷小算符与之对应，但它们彼此不对易. 由于同时对易的无穷小算符只有一个，所

以，转动群的秩为 1.

找寻转动群的全部不可约表示的问题，等价于找寻李代数(9)式的全部可能的构造. 转动群的不可约表示将在第七章中讨论.

若引入

$$L_j = - iI_j, \quad j = 1,2,3 \tag{12}$$

式中 L_j 是厄密的，则由(9)式可得 L_j 满足如下的封闭的代数关系：

$$[L_j, L_k] = i\varepsilon_{jkl}L_l \tag{13}$$

根据上式，(11)式可表为

$$R(\mathrm{d}\alpha_1, \mathrm{d}\alpha_2, \mathrm{d}\alpha_3) = E + \sum_{j=1}^{3} \mathrm{i}\mathrm{d}\alpha_j L_j \tag{14}$$

容易证明，群的唯一的不变量是

$$L^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2 \tag{15}$$

这个算符能够与全部无穷小算符对易，因而也就能与给定表示的所有元素对易，因此 L^2 就是卡塞米尔算符. 正像群表示理论中知道的那样，群的每一个不可约表示将由这个不变量的一个本征值所表征.

2. 群的无穷小算符

我们讨论没有自旋的点粒子. 考虑绕 z 轴的无穷小旋转，从(5)式可以知道，基本可观察量的无穷小改变为

$$\left.\begin{aligned} \delta p_1 &= \delta\alpha p_2 \\ \delta p_2 &= - \delta\alpha p_1 \\ \delta p_3 &= 0 \end{aligned}\right\} \qquad \left.\begin{aligned} \delta q_1 &= \delta\alpha q_2 \\ \delta q_2 &= - \delta\alpha q_1 \\ \delta q_3 &= 0 \end{aligned}\right\} \tag{16}$$

用 $\mathscr{G}_3$ 记无穷小算符，从 § 2(14)式我们得到

$$\left.\begin{aligned} [\mathscr{G}_3, q_1] = iq_2, \quad [\mathscr{G}_3, q_2] = - iq_1, \quad [\mathscr{G}_3, q_3] = 0 \\ [\mathscr{G}_3, p_1] = ip_2, \quad [\mathscr{G}_3, p_2] = - ip_1, \quad [\mathscr{G}_3, p_3] = 0 \end{aligned}\right\} \tag{17}$$

利用基本对易关系，容易得到这些方程的解是

$$\mathscr{G}_3 = \frac{1}{\hbar}(q_1 p_2 - q_2 p_1) \tag{18}$$

这个算符从基本量子理论中已知，除数值因子 $\frac{1}{\hbar}$ 外，它是轨道

角动量第三分量算符,即

$$\mathscr{G}_3 = \frac{1}{\hbar}L_3 \tag{19a}$$

考虑到绕其他两个轴的旋转,可得到相似的结果

$$\mathscr{G}_1 = \frac{1}{\hbar}L_1 \tag{19b}$$

$$\mathscr{G}_2 = \frac{1}{\hbar}L_2 \tag{19c}$$

这样,我们就可以把轨道角动量作为空间转动群 SO_3 的无穷小算符.

根据 § 2(13)式,绕 z 轴的转动在希尔伯特空间的表示为

$$U[R_k(a)] = \exp(-\frac{i}{\hbar}aL_3) \tag{20}$$

对于任意有限转动 $R(a_1,a_2,a_3)$,它在希尔伯特空间的表示为

$$U[R(a_1,a_2,a_3)] = \exp[-\frac{i}{\hbar}(a_1L_1 + a_2L_2 + a_3L_3)] \tag{21}$$

3. 转动不变性和角动量守恒

现在我们假定,空间是各向同性的(isotropic),这就意味着在旋转变换下封闭系具有不变性. 根据 § 2(15)、(16)两式和本节(19)式,可得到

$$\left.\begin{aligned} &[H,U(R)] = 0 \\ &[H,\mathscr{G}_k] = 0, \quad k = 1,2,3 \\ &[H,L_k] = 0, \quad k = 1,2,3 \end{aligned}\right\} \tag{22}$$

由此可见,绕三个轴的旋转不变性导致角动量三个分量均为守恒量. 注意到 $L^2=L_1^2+L_2^2+L_3^2$,亦有

$$[H,L^2] = 0 \tag{23}$$

因此,体系的旋转不变性导致体系角动量(它的数值和它沿任意方向的分量)守恒.

4. 推广到总角动量情形

以上结果可以推广到具有自旋的点粒子. 设可观察量自旋 S_k $(k=1,2,3)$具有类似于(16)、(17)和(19)诸式的表示式:

$$\delta S_1 = \delta a S_2, \quad \delta S_2 = -\delta a S_1, \quad \delta S_3 = 0 \tag{16'}$$

$$[\mathscr{G}_3^{(S)}, S_1] = iS_2, \quad [\mathscr{G}_3^{(S)}, S_2] = -iS_1, \quad [\mathscr{G}_3^{(S)}, S_3] = 0 \tag{17'}$$

$$\mathscr{G}_k^{(S)} = \frac{1}{\hbar} S_k \tag{19'}$$

并设

$$\mathscr{G}_3 = \mathscr{G}_3^{(q)} + \mathscr{G}_3^{(S)} \tag{24}$$

于是,对于具有自旋的点粒子,可用总角动量

$$J_k = L_k + S_k, \quad k = 1,2,3 \tag{25}$$

代换各式中的 L_k,例如可将(20)式改写成

$$U = \exp[-\frac{i}{\hbar}a(L_3 + S_3)]$$

$$= \exp[-\frac{i}{\hbar}aJ_3] \tag{20'}$$

(22)式和(23)式分别改写成

$$[H, J_k] = 0, \quad k = 1,2,3 \tag{22'}$$

$$[H, J^2] = 0 \tag{23'}$$

表示总角动量和它的分量均为守恒量.

§6 空间反射不变性与宇称守恒

在前面的几节中,我们讨论了连续的时空对称性变换及其结果.本节和下一节我们将对分立的时空对称性群感兴趣.

1.空间反射变换 宇称算符

(1) 空间反射变换

空间反射变换由下式给出:

$$\boldsymbol{r} \xrightarrow{I} -\boldsymbol{r} \tag{1}$$

这个变换又称反演(inversion).反演矩阵可表为

$$I = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{2}$$

我们已经知道，空间反射操作 I 和恒等操作 E 这两个元素构成空间反射群，它是阿贝尔群.

(2) 宇称算符

现在我们来确定，在希尔伯特空间中反演的表示. 让我们再考虑具有自旋的点粒子，其基本算符集是 $q_1, q_2, q_3; p_1, p_2, p_3; S_1, S_2, S_3$. 由于坐标算符和动量算符都是极矢量，在反射变换下改变符号，故

$$q_k \to -q_k, \quad p_k \to -p_k, \quad k = 1,2,3 \tag{3a}$$

但自旋是一种角动量，它的行为像轴矢量，即

$$S_k \to S_k, \quad k = 1,2,3 \tag{3b}$$

因为我们处理的是分立变换，利用基本方程(第五章 § 2(10)式)

$$A_i' = UA_iU^+, \quad i = 1,2,\cdots,n$$

于是得到

$$\left.\begin{aligned} U(I)q_kU^+(I) &= -q_k \\ U(I)p_kU^+(I) &= -p_k \\ U(I)S_kU^+(I) &= S_k, \end{aligned}\right\} \quad k = 1,2,3 \tag{4}$$

或写成

$$\left.\begin{aligned} \{U(I), q_k\} &= 0 \\ \{U(I), p_k\} &= 0 \\ [U(I), S_k] &= 0 \end{aligned}\right\} \tag{5}$$

式中{…}表示反对易子(anticommutator). 可以证明，不存在由基本变数 q_k, p_k, S_k 构成的算符 U 能够满足(5)式的性质，这就意味着，算符 $U(I)$不对应任何经典的可观察量，因而与空间反射不变性(space reflection invariance)相联系的守恒定律没有经典对应.

为了更明显地看出 $U(I)$的作用，引入波函数是方便的. 对一般的态 $|\Phi\rangle$，其反射变换态(叫做它的镜像态)为

$$|\Phi'\rangle = U(I)|\Phi\rangle \tag{6}$$

现在引入基矢 $|\boldsymbol{r}, S_3\rangle$，则任意态 $|\Phi\rangle$在坐标表象中的分量为

$$\langle \boldsymbol{r}, S_3 | \Phi\rangle = \varphi(\boldsymbol{r}, S_3) \tag{7}$$

于是，我们得到

$$\varphi'(\boldsymbol{r}, S_3) = \langle \boldsymbol{r}, S_3 | \Phi'\rangle = \langle \boldsymbol{r}, S_3 | U(I) | \Phi\rangle$$

$$=\int d^3r' \sum_{s_3'=-s}^{+s} \langle r, S_3 | U(I) | r', S_3' \rangle \langle r', S_3' | \Phi \rangle$$

$$=\int d^3r' \sum_{s_3'} \langle r, S_3 | U(I) | r', S_3' \rangle \varphi(r', S_3') \tag{8}$$

因为 $\varphi'(r,S_3)$是在反射坐标系(reflected coordinate system)中的态函数,应有

$$\varphi'(r,S_3) = \varphi(-r,S_3) \tag{9}$$

比较上面两式,意味着算符 $U(I)$在坐标表象中的矩阵元为

$$\langle r,S_3 | U(I) | r',S_3' \rangle = \delta_{s_3 s_3'} \delta(r+r') \tag{10}$$

由此我们得到

$$U(I)\varphi(r,S_3) = \varphi(-r,S_3) \tag{11}$$

即空间反射算符 $U(I)$对态函数作用,其结果是将宗量中的 r 改变为$-r$. 我们把空间反射算符 $U(I)$称为宇称算符(parity operator).

现在我们对态函数施行两次反射,即

$$\begin{aligned} U^2(I)\varphi(r,S_3) &= U(I)U(I)\varphi(r,S_3) \\ &= U(I)\varphi(-r,S_3) \\ &= U(I)(r,S_3) \end{aligned} \tag{12}$$

由于 $\varphi(r,S_3)$是任意的,故有

$$U^2(I) = E \tag{13}$$

由此可得
$$U^{-1}(I) = U^+(I) = U(I) \tag{14}$$

可见 $U(I)$既是幺正的,又是厄密的. 因此,我们可以把 $U(I)$看作是与反射变换相对应的物理量的算符.

(3) 宇称算符的本征值　偶宇称和奇宇称

我们来讨论宇称算符 $U(I)$的本征值. 设本征值为 p',则由(13)式容易得出

$$p'^2 = 1, \quad p' = \pm 1 \tag{15}$$

本征值 p' 称为宇称. 宇称算符的本征态有两个,即

$$U(I)\varphi(r,S_3) = \varphi(r,S_3) \tag{16}$$

$$U(I)\varphi(r,S_3) = -\varphi(r,S_3) \tag{17}$$

我们称(16)式表示的态具有偶宇称(even parity),即属于 $U(I)$本

征值为＋1的本征态具有偶宇称；而(17)式表示的态则具有奇宇称(odd parity)，即属于 $U(I)$本征值为－1的本征态具有奇宇称.

(4) 内禀宇称

应该指出，宇称既决定于粒子的内禀性质，也决定于体系的态. 注意到(4)式，仍然允许 $U(I)$定义本身符号的不定性，这就意味着(9)式应修改为

$$\varphi'(\boldsymbol{r},S_3)=\xi\varphi(-\boldsymbol{r},S_3) \tag{18}$$

式中

$$\xi=+1\text{或}-1 \tag{19}$$

ξ 称为粒子的内禀宇称(intrinsic parity). ±1的选择对每一种类型的粒子是任意的，但对所有可能的态必须取相同的值. 在基本量子理论中，除自旋之处，粒子的内禀性质可以忽略，因而它们之间没有区别，并且对每一种粒子 ξ 取值＋1. 但在基本粒子的场论中，情况有很大的不同，必须比较不同种类粒子的内禀性质.

我们将(18)式改写成

$$U(I)\varphi(\boldsymbol{r},S_3)=\xi\varphi(-\boldsymbol{r},S_3) \tag{20}$$

注意到宇称与轨道角动量能够同时测量，这是因为：① $U(I)$与旋转的表示 $U(\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3)$对易，因而总角动量 J 与 $U(I)$对易；② 由(4)式知 $U(I)$与自旋角动量对易. 这样，我们假定 $\varphi(r,S_3)$是轨道角动量算符属于轨道角动量量子数 l 的本征态. 这就意味着

$$\varphi(\boldsymbol{r},S_3)\sim Y_l^m(\theta,\varphi) \tag{21}$$

由于众所周知的球谐函数(spherical harmonics)的性质，我们有

$$\varphi(\boldsymbol{r},S_3)\sim Y_l^m(\pi-\theta,\varphi+\pi)=(-1)^l Y_l^m(\theta,\varphi) \tag{22}$$

使得

$$\varphi(-\boldsymbol{r},S_3)=(-1)^l\varphi(\boldsymbol{r},S_3) \tag{23}$$

于是，(20)式变成

$$U(I)\varphi(\boldsymbol{r},S_3)=\xi(-1)^l\varphi(\boldsymbol{r},S_3) \tag{24}$$

这是宇称算符 $U(I)$的本征方程，本征值为

$$p'=\xi(-1)^l \tag{25}$$

习惯上称$(-1)^l$为轨道宇称(orbital parity). 因此，由上式可见，总宇称是内禀宇称和轨道宇称的乘积. 在基本量子理论中，“总宇称”和“轨道宇称”没有区别，因为如上所述，ξ 总是取＋1.

对于复合体系，态函数可以表示为单粒子态函数乘积的线性组合，因而，复合体系的内禀宇称是各组分内禀宇称的乘积，而且由于每个粒子的坐标宗量改变符号，所以

$$U(I)\varphi(r_1,r_2,\cdots,r_n,S_3^1,S_3^2,\cdots,S_3^n)$$
$$=\xi_1\xi_2\cdots\xi_n\varphi(-r_1,-r_2,\cdots,-r_n,S_3^1,S_3^2,\cdots,S_3^n) \qquad (26)$$

由此得到，象单粒子情形那样，具有确定轨道角动量的态是宇称本征态，宇称本征值为

$$p' = \xi_1\xi_2\cdots\xi_n(-1)^L \qquad (27)$$

式中L是复合体系的轨道角动量量子数，L的计算必须遵照角动量相加法则. 实质上L是在质心系中的相对轨道角动量量子数. 特别是，如果体系处于 s 态，$L=0$，则 p'就等于内禀宇称的乘积. 这表明，与动量、能量和角动量的分量不同，宇称不是相加性(additive)量子数，而是相乘性(multiplicative)量子数. 这是因为 $U(I)$本身是厄密算符，而动量、角动量等厄密算符出现在指数上，指数的乘积导致幂的和，所以得到相加性量子数.

2. 物理量按空间反射性质分类

通常的矢量和标量是根据其在旋转变换下的性质来分类的. 我们定义在旋转变换下不变的量为标量，按坐标一样变换的量叫矢量. 但是在反射下，矢量和标量都分奇、偶两类. 因此，有必要对它们进一步分类.

(1) 极矢量(polar vectors)——在反射变换下改变符号的矢量叫极矢量，即

$$U(I)A_iU^+(I)=-A_i,\quad i=1,2,3 \qquad (28)$$

因为在反射下，右(左)手坐标系变为左(右)手坐标系，故极矢量也就是在左、右手坐标系中相同的矢量，亦叫真矢量. 通常的坐标、动量、加速度、矢势和电场强度等都是极矢量.

(2) 赝矢量(pseudo-vectors)或轴矢量(axial vectors)——在反射变换下不改变符号的矢量叫赝矢量，即

$$U(I)A_iU^+(I)=A_i,\quad i=1,2,3 \qquad (29)$$

赝矢量也就是在左、右手坐标系中反号的矢量. 可以证明，两极矢

量的矢积 $\mathbf{A}\times\mathbf{B}$ 是赝矢量.轨道角动量和磁场就是赝矢量,自旋角动量也是赝矢量.

(3) 标量(scalar)——在旋转变换下不变,而且在反射变换下数值和符号都不变的量叫标量,即

$$U(I)aU^{+}(I)=a \tag{30}$$

两同类(极或轴)矢量的标积 $\mathbf{A}\cdot\mathbf{B}$ 就是标量.

(4) 赝标量(pseudo scalar)——在旋转变换下不变,但在反射变换下数值不变而改变符号的量叫赝标量,即

$$U(I)aU^{+}(I)=-a \tag{31}$$

两不同类矢量的标积,三矢量的混合积 $\mathbf{A}\cdot\mathbf{B}\times\mathbf{C}$ 都是赝标量.

实验指出,各种基本粒子都具有一定的对称性,因而要用各种不同对称性的量来表征.如 π 介子场具有空间旋转不变性,自旋为零,故它们的场量应是标量或赝标量.但实验进一步指出,它们在空间反射下变号,故 π 介子的场量是赝标量.

3. 空间反射不变性与宇称守恒

现在我们来讨论宇称守恒问题.我们假定,空间具有左右不可区分的(indistinguishable)性质,人们可以不加选择地利用左手坐标系或右手坐标系来描述物理现象;换句话说,我们假定体系对空间坐标系原点的反射具有不变性,这就意味着体系的哈密顿量具有反射不变性:

$$U(I)HU^{+}(I)=H \tag{32}$$

可见 H 是一标量.注意到 $U(I)$ 的幺正性(14)式,上式成为

$$[H,U(I)]=0 \tag{33}$$

可见,反射不变性导致 $U(I)$ 与哈密顿量对易,因此,宇称算符对应的物理量宇称是运动恒量,即体系具有反射不变性时,宇称守恒.当体系不受外场作用,或外场对坐标原点具有反射对称性(例如辏力场)时,宇称是守恒的.

宇称守恒定律和其它守恒定律同样地对研究微观粒子运动规律有很大的指导意义.我们知道一个基本粒子体系通过其内部粒子间的相互作用可以转化为一个新的基本粒子体系,如果体系的

哈密顿量对空间反射保持不变，则由宇称守恒定律可知，转化前后体系的宇称必须相同.

以前人们认为所有粒子体系的哈密顿量对空间反射都保持不变，即左手坐标系和右手坐标系是等价的，或者说物理过程与其镜象过程是对称的，因而认为宇称守恒定律是微观世界中的普遍规律. 1956 年，李政道和杨振宁发现对于象K介子衰变(decay)，β 衰变等弱相互作用过程，体系的哈密顿量并不具有对空间反射保持不变的性质，因而指出在弱作用过程中宇称不守恒(nonconservation of parity). 1957 年由吴健雄等人完成的^{60}Co 的 β 衰变实验证实了"宇称违背"("parity violation"). 李、杨的这个发现，大大地推动了基本粒子理论的研究.

与空间平移对称的情形类似，空间反射对称时，体系既可以处于具有确定宇称的状态(即宇称本征态)，也可以处于不具有确定宇称的状态. 例如，一维谐振子的本征态 $\psi_n(x)$和氢原子的本征态 $\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)$都是具有确定宇称的状态(分别为$(-1)^n$ 和$(-1)^l$)，而自由粒子的态 $\psi=e^{ikx}$不具有确定的宇称. 但是，任一不具有确定宇称的态可以看成是两个具有确定宇称的态的迭加：$\psi=\psi_++\psi_-$，ψ_+、ψ_-分别为具有偶宇称和奇宇称的态. 例如

$$\psi = e^{ikx} = \frac{1}{2}(e^{ikx} + e^{-ikx}) + \frac{1}{2}(e^{ikx} - e^{-ikx})$$

$$= \cos kx + i\sin kx$$

其中 $\cos kx$ 和 $\sin kx$ 分别具有偶宇称和奇宇称.

4. 关于宇称的选择定则

如果算符满足下列关系：

$$U(I)A_+ U^+ (I) = A_+ \tag{34}$$

$$U(I)A_- U^+ (I) = - A_- \tag{35}$$

则 A_+称为偶算符(even operator)，A_-称为奇算符(odd operator). 例如(4)式中，坐标和动量是奇算符，而自旋是偶算符.

对于具有奇、偶性质的算符，其在确定的宇称态之间的矩阵元存在选择定则(selection rules).

设$|\lambda'\rangle$和$|\lambda''\rangle$分别表示具有确定宇称为λ'和λ''的态，则对偶算符A_+有

$$\begin{aligned}\langle\lambda'|A_+|\lambda''\rangle &= \langle\lambda'|U^+(I)U(I)A_+U^+(I)U(I)|\lambda''\rangle \\ &= \lambda'\lambda''\langle\lambda'|U(I)A_+U^+(I)|\lambda''\rangle \\ &= \lambda'\lambda''\langle\lambda'|A_+|\lambda''\rangle\end{aligned}$$

即
$$(1-\lambda'\lambda'')\langle\lambda'|A_+|\lambda''\rangle = 0 \tag{36}$$

可见$\langle\lambda'|A_+|\lambda''\rangle$不为零 的条件是$\lambda'\lambda''=1$，而$\lambda'\lambda''=1$意味着初、末两态具有相同的宇称. 于是得出结论，偶算符在具有确定宇称的两态之间的矩阵元不为零的条件是此两态具有相同的宇称.

对于奇算符，类似地有

$$\begin{aligned}\langle\lambda'|A_-|\lambda''\rangle &= \lambda'\lambda''\langle\lambda'|U(I)A_-U^+(I)|\lambda''\rangle \\ &= -\lambda'\lambda''\langle\lambda'|A_-|\lambda''\rangle\end{aligned}$$

即
$$(1+\lambda'\lambda'')\langle\lambda'|A_-|\lambda''\rangle = 0 \tag{37}$$

可见$\langle\lambda'|A_-|\lambda''\rangle$不为零的条件是$\lambda'\lambda''=-1$，而$\lambda'\lambda''=-1$意味着初、末两态具有相反的宇称. 于是得出结论，奇算符在具有确定宇称的两态之间的矩阵元不为零的条件是此两态具有相反的宇称.

§7 时间反射不变性及其推论

我们现在要讨论的第二个分立的时空对称性是时间反射(time reflection)，常常称为时间反转(time reversal).

1. 经典力学中的时间反转

时间反转的定义是

$$t \xrightarrow{T} t' = -t \tag{1}$$

$$\boldsymbol{r} \xrightarrow{T} \boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r} \tag{2}$$

所谓时间反转不变性就是物理过程与时间流逝的方向无关. 在经典力学中，在许多情形下，体系具有时间反转不变性. 如质点在保守力作用下的运动就是如此. 事实上，

$$\boldsymbol{v}' = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}'}{\mathrm{d}t'} = -\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} = -\boldsymbol{v} \tag{3}$$

或
$$p' = -p \tag{4}$$

而
$$a' = \frac{d^2 r'}{dt'^2} = \frac{d^2 r}{dt^2} = a \tag{5}$$

注意到保守力与时间无关，它具有时间反转不变性：

$$F' = F \tag{6}$$

因而有

$$m\frac{d^2 r}{dt^2} = F \tag{7}$$

$$m\frac{d^2 r'}{dt'^2} = F' \tag{8}$$

可见，在时间反转变换前后质点的运动方程保持不变. 这就是说，如果 $r(t)$和 $p(t)$是运动方程的解，则其时间反转态 $r(-t)$和 $-p(-t)$也是方程的解，即如果状态 $r(t)$，$p(t)$是可以实现的话，则状态 $r(-t)$和 $-p(-t)$也是可以实现的. 可见，质点在 t 时刻的位置等于 $-t$ 时刻的位置，但动量(或速度)则反号.

维格纳曾经指出，"时间反转态"并不意味着真正的时间倒流，而只不过是"运动方向的倒转"(reversal of direction of motion). 如果用轨道(trajectory)来描述质点的运动，则时间反转下质点的轨道与反转的轨道相同，但质点运动方向反转(图 6-1).

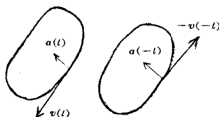


图 6-1

与其他时空对称性不同，时间反射在经典力学中不是正则变换. 设 H 为质点的哈密顿量，H'为时间反射下的哈密顿量. H'由 $q_k' \equiv q_k$，$p_k' \equiv -p_k$ 构成，其构成方式与 q_k、p_k 构成 H 一样，则有

$$\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k}, \quad \dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k} \tag{9}$$

$$\dot{q}_k' = -\frac{\partial H'}{\partial p_k'}, \quad \dot{p}_k' = \frac{\partial H'}{\partial q_k'} \tag{10}$$

(10)式与(9)式符号反转，因而我们处理的是反正则变换.

时间反转不变性的原因是，拉格朗日函数仅决定于速度的二次幂，因而 $L(q,\dot{q})=L(q,-\dot{q})$. 如果质点所受的力与速度的奇次幂成比例，则力要变号，从而运动方程要改变，轨道就不能维持原样了，过程也就不是可逆的了，这时便不存在时间反转不变性. 例如质点在耗散力作用下的运动，以及带电粒子在磁场中的运动（图 6-2）.

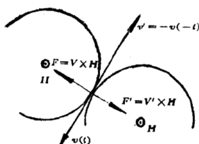


图 6-2

2. 量子力学中的时间反转算符

时间反射变换由下式给出：

$$t \xrightarrow{T} -t \tag{11}$$

时间反转变换 T 和恒等变换 E 这两个元素组成时间反射变换群，它是阿贝尔群.

我们来确定时间反转在希尔伯特空间的表示. 为了简单，我们先讨论没有自旋的点粒子，基本算符是 q_k 和 p_k，在时间反射下它们作如下变换：

$$q_k \to q_k, \quad p_k \to -p_k \tag{12}$$

时间反转算符 $U(T)$ 不可能是幺正的，因为由上式可知，在时间反射下，$[p_i, q_k] \to -[p_i, q_k]$，这意味着 $U(T)(\frac{\hbar}{i})U^+(T) = -\frac{\hbar}{i}$. 因此，我们必须寻找具有如下性质的反幺正算符：

$$\left.\begin{aligned} U(\lambda|\Phi\rangle) &= \lambda^* U|\Phi\rangle \\ \langle U\Phi|U\Psi\rangle &= \langle\Psi|\Phi\rangle \end{aligned}\right\} \tag{13}$$

由于时间反射是分立变换，利用基本方程

$$A_i' = UA_iU^+, \quad i = 1,2,\cdots,n$$

并注意(12)式，则时间反转算符由下式确定：

$$\left.\begin{aligned} U(T)q_kU^+(T) &= q_k \\ U(T)p_kU^+(T) &= -p_k \end{aligned}\right\}, \quad k = 1,2,3 \tag{14}$$

或
$$\left.\begin{aligned}[U(T), q_k] = 0 \\ \{U(T), p_k\} = 0\end{aligned}\right\} \tag{14'}$$

象空间反射那样,时间反转算符也不可能由 q_k 和 p_k 构成,即是说它不对应于经典的可观察量.同时,我们也不用“时间宇称”(“time parity”)来标志体系的态,因为它不是线性算符,因而不是量子力学意义上的可观察量.

利用(12)式和(14)式可得到轨道角动量 L 的变换

$$L_k = [q \times p]_k \to - L_k \tag{15}$$

即
$$\begin{aligned} U(T)L_kU^+(T) &= U(T)(r \times p)_kU^+(T) \\ &= - L_k, \quad k = 1,2,3 \end{aligned} \tag{16}$$

即
$$\{U(T), L_k\} = 0 \tag{16'}$$

时间反射不变性意味着

$$[H, U(T)] = 0 \tag{17}$$

虽然时间反转算符 $U(T)$ 与哈密顿量对易,但我们不说 $U(T)$ 对应一个守恒量,因为 $U(T)$ 是反线性算符,它不是量子力学意义上的可观察量;此外 $\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} = \frac{i}{\hbar}[H, A]$ 也只对线性算符才成立.

我们来讨论,在时间反射下,薛定谔方程的不变性问题.把反幺正算符 $U(T)$ 作用于薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = H|\psi(t)\rangle \tag{18}$$

得到
$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{\partial}{\partial t}[U(T)|\psi(t)\rangle] &= U(T)H|\psi(t)\rangle \\ &= HU(T)|\psi(t)\rangle \end{aligned}$$

其中左边利用了 $U(T)$ 的反线性性质.改变变数 $t \to -t$,上式变成:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(U(T)|\psi(-t)\rangle) = H(U(T)|\psi(-t)\rangle) \tag{19}$$

比较(19)式与(18)式可知,$U(T)|\psi(-t)\rangle$ 与 $|\psi(t)\rangle$ 均满足薛定谔方程,即时间反转态

$$|\psi'(t)\rangle = U(T)|\psi(-t)\rangle \tag{20}$$

与 $|\psi(t)\rangle$ 均是薛定谔方程的解.

为了看清楚(20)式的意义，我们取特殊的基，例如取坐标表象. 这时，哈密顿量取通常的形式

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r})$$

薛定谔方程为

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = H\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{21}$$

用 $U(T)$ 作用于上式两边，注意到 $[H,U(T)]=0$，得

$$-i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},-t)}{\partial t} = H\psi(\boldsymbol{r},-t)$$

可见 $\psi(-t)$ 不满足薛定谔方程，但如果取上式的复共轭，得

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\psi^*(\boldsymbol{r},-t)}{\partial t} &= H^*\psi^*(\boldsymbol{r},-t) \\ &= H\psi^*(\boldsymbol{r},-t) \end{aligned} \tag{22}$$

比较(22)式和(21)式可知，当 $H^*=H$（即 H 为实数）时，$\psi^*(\boldsymbol{r},-t)$ 和 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 均是薛定谔方程的解，即在时间反射坐标系中观察到的态（时间反转态）应为：

$$\psi'(\boldsymbol{r},t) = \psi^*(\boldsymbol{r},-t) \tag{23}$$

例如沿 x 方向以动量 p 和能量 E 运动的自由粒子，其波函数为

$$\psi(x,t) = e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}$$

取 $t\to -t$，得

$$\psi(x,-t) = e^{\frac{i}{\hbar}(px+Et)}$$

它不是自由粒子薛定谔方程的解，不代表粒子的真实运动. 但是取上式的复共轭

$$\psi^*(x,-t) = e^{\frac{i}{\hbar}(-px-Et)}$$

它也是自由粒子薛定谔方程的解，表示能量仍为 E，但动量 p 沿 $-x$ 方向运动的自由粒子.

若在坐标表象中引进复共轭算符(operator of complex conjugation) K，它作用于波函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 上得到复共轭波函数

$\psi^*(r,t)$，即

$$K\psi(r,t) = \psi^*(r,t) \tag{24}$$

则(23)式可改写成

$$\psi'(r,t) = K\psi(r,-t) \tag{25}$$

对比(20)式和(25)式可见，时间反转算符 $U(T)$ 在坐标表象中就是 K，即

$$U(T) = K \tag{26}$$

它是最简单的反线性算符. 由(26)式显然可得

$$U^2(T) = E \tag{27}$$

3. 具有自旋的粒子

现在我们讨论粒子具有自旋时的时间反转. 因为自旋是一种角动量，类似(15)和(16)两式，有

$$\left.\begin{aligned} & S_k \to - S_k \\ & U(T)S_kU^+(T) = - S_k \\ & \{U(T), S_k\} = 0 \end{aligned}\right\} \tag{28}$$

为了构造算符 $U(T)$，我们取习惯的表示方法，这时最大的完全集取 q_1, q_2, q_3, S_3, S^2. 因而我们处理的是波函数 $\psi(r, S_3)$. 在这个表象中，取

$$U(T) = BK \tag{29}$$

其中 K 是上面定义的复共轭算符，B 是仅与自旋有关的线性幺正算符. 同时，我们有如下关系式：

$$\left.\begin{aligned} & KS_1K^+ \equiv S_1^* = S_1 \\ & KS_2K^+ \equiv S_2^* = - S_2 \\ & KS_3K^+ \equiv S_3^* = S_3 \end{aligned}\right\} \tag{30}$$

上式的证明是由于所有 S_k 都是厄密的，在这个特定的表象中 S_3 是对角的，因此立刻得到 $S_3^* = S_3$，其余两个关系可利用对易关系

$$[S_j, S_k] = i\varepsilon_{jkl}S_l$$

证明之.

由(30)、(29)和(28)诸式可得

$$\left.\begin{aligned} BS_1B^+ &= -S_1 \\ BS_2B^+ &= S_2 \\ BS_3B^+ &= -S_3 \end{aligned}\right\} \tag{31}$$

我们知道，在普通三维空间中，绕 y 轴旋转 π 角时，$x\to -x, y\to y, z\to -z$，因此，上式表示在自旋空间中绕 S_2 轴旋转 π 角的变换. 如果令

$$B = e^{-\frac{i}{\hbar}\pi S_2} \tag{32}$$

则可满足(31)式. 将上式代入(29)式，便得到 $U(T)$ 在特定的基(特定的表象)中的表示式

$$U(T) = e^{-\frac{i}{\hbar}\pi S_2}K \tag{33}$$

例如对于自旋为$\frac{1}{2}$的粒子(电子、质子、中子等)，由于

$$S_k = \frac{1}{2}\hbar\sigma_k$$

其中 σ_k 为泡利矩阵，则有

$$B = -i\sigma_2 \tag{34}$$

$$U(T) = -i\sigma_2 K \tag{35}$$

4. 时间反射不变性的几个重要推论

时间反射不变性虽然不对应于某个守恒定律，但是这种不变性仍然可以得到若干重要的结果.

(1) 双时间反射不变性导致克雷末斯(Kramers)简并

体系的物理性质在双重时间反射下一定保持不变，即态 $U^2|\psi\rangle$ 在物理上与 $|\psi\rangle$ 本身相同，这就意味着所有可能的态都是 U^2 的本征态，即

$$U^2|\Psi\rangle = c|\Psi\rangle \tag{36}$$

其中常数 c 对所有的态 $|\Psi\rangle$ 均相同. 然而，这并不意味着 U^2 是一个单位算符，从(32)式容易得到

$$U^2 = e^{-2\pi\pi(\frac{i}{\hbar})s_2} \tag{37}$$

由上式可知，U^2 是幺正算符.

下面我们来确定(36)式中的常数 c，利用 U 的反幺正性(13)式：

$$(U\Phi, U\Psi) = (\Psi, \Phi)$$

我们有
$$(\Phi, U\Psi) = (U^2\Psi, U\Phi) = c(\Psi, U\Phi)$$
$$= c(U^2\Phi, U\Psi) = c^2(\Phi, U\Psi) \tag{38}$$

于是 $c=+1$ 或 -1，由体系的性质决定，即算符 U^2 的本征值为 $+1$ 或 -1. 设对 $c=+1$ 的态用 $|\Phi_+\rangle$ 表示，$c=-1$ 的态用 $|\Phi_-\rangle$ 表示，则有

$$\left.\begin{aligned} U^2|\Phi_+\rangle &= |\Phi_+\rangle \\ U^2|\Phi_-\rangle &= -\ |\Phi_-\rangle \end{aligned}\right\} \tag{39}$$

对于 $c=-1$ 的所有可能的态 $|\Phi_-\rangle$，令(36)式中 $|\Psi\rangle=|\Phi_-\rangle$，则有

$$(\Phi_-, U\Phi_-) = -\ (\Phi_-, U\Phi_-)$$

由上式立刻得到

$$(\Phi_-, U\Phi_-) = 0 \tag{40}$$

或
$$\langle\Phi_-\ |U|\Phi_-\rangle = 0 \tag{40'}$$

即态 $|\Phi_-\rangle$ 与时间反转态 $U|\Phi_-\rangle$ 是正交的.

如果在时间反射下哈密顿量保持不变，即 $[H, U(T)]=0$，或 $|\Phi_-\rangle$ 是 H 的本征态：

$$H|\Phi_-\rangle = E|\Phi_-\rangle$$

则 $U(T)|\Phi_-\rangle$ 也是 H 具有相同本征值 E 的本征态：

$$HU(T)|\Phi_-\rangle = U(T)H|\Phi_-\rangle = EU(T)|\Phi_-\rangle$$

而由(40′)式知，$|\Phi_-\rangle$ 与 $U|\Phi_-\rangle$ 是正交的，彼此独立的，它们代表两个不同的态，于是就出现了体系能级的双重简并. 这种由于时间反转不变性引起的简并称为克雷末斯简并(Kramers degeneracy). 也就是说，在 U^2 的本征值 $c=-1$ 和时间反射下哈密顿量的不变性导致克雷末斯简并.

可以证明，对 n 个自旋为 $\frac{\hbar}{2}$ 的粒子组成的体系

$$U^2(T) = \prod^{n}(-\,i\sigma_{k_2})^2 = \prod^{n}(-\,1) = (-\,1)^n \tag{41}$$

可见，当组成体系的粒子数 n 为偶数时 U^2 的本征值是 $+1$，n 为奇数时，U^2 的本征值是 -1. 因此，对克雷末斯简并，我们可以陈述如

下：对于具有奇数个电子组成的体系，时间反射不变性导致体系能级简并，简并度为偶数，这就是克雷末斯定理，是他在研究晶体中的电子轨道时首先提出的.

外电场具有时间反转对称性，不能消除时间反转对称性引起的克雷末斯简并. 因此，具有奇数个电子的原子，即使在外电场存在时，能级仍然是双重简并的.

外磁场则不同，它的存在使 H 中含有 $\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}$、$\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}$ 之类的项，这类项不具有时间反转对称性，因而磁场的存在破坏了时间反转对称性，从而可以消除克雷末斯简并.

至于体系内的带电粒子运动产生的内磁场 B_k，由于时间反射时，粒子的速度或电流方向都反转，B_k 也要随着变号，因而这种内磁场引起的自旋与自旋、自旋与轨道、轨道与轨道相互作用仍具有时间反转不变性，故内磁场的存在并不破坏时间反转对称性.

(2) 双时间反射不变性导致超选择定则(superselection rule)

由于 U^2 的本征值为 ± 1，所有可能的物理状态区分为两类，即 $|\Phi_+\rangle$ 和 $|\Phi_-\rangle$，由(39)式表示. 这样，希尔伯特空间便分为两个彼此正交而又互不相干(incoherent)的子空间. 事实上，如果 A 是一个任意可观察量，利用(39)式及反幺正算符的性质，我们有

$$\begin{aligned}(\Phi_+, A\Phi_-) &= (UA\Phi_-, U\Phi_+)\\ &= (U^2\Phi_+, U^2A\Phi_-)\\ &= (U^2\Phi_+, AU^2\Phi_-)\\ &= 1\times(-1)(\Phi_+, A\Phi_-)\\ &= -(\Phi_+, A\Phi_-)\end{aligned}$$

故

$$(\Phi_+, A\Phi_-) = 0 \tag{42}$$

或写成

$$\langle\Phi_+|A|\Phi_-\rangle = 0 \tag{42'}$$

由此得出结论，任意可观察量在不同子空间 $\{\Phi_+\}$ 和 $\{\Phi_-\}$ 中的两个态之间的矩阵元为零，这就意味着，具有偶数个半奇数自旋粒子的体系的态和具有奇数个半奇数自旋粒子的体系的态之间存在一个超选择定则.

(3) 时间反射不变性导致细致平衡定理(detailed balance

theorem)

时间反射不变性的另一个结果是细致平衡定理.

在相互作用绘景中,根据第五章§3(60)式知

$$|\Psi^I(t)\rangle = U_i(t,t_0)|\Psi^I(t_0)\rangle \tag{43}$$

其中演化算符 $U_i(t,t_0)$满足

$$\left.\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U_i(t,t_0) &= H_i^I U_i(t,t_0) \\ U_i(t_0,t_0) &= 1 \end{aligned}\right\} \tag{44}$$

定义 S 矩阵(参阅第八章§5(29)、(30)式):

$$S \equiv \lim_{\substack{t\to\infty \\ t_0\to-\infty}} U_i(t,t_0) = U_i(+\infty,-\infty) \tag{45}$$

则有

$$S^+ = U_i^+(+\infty,-\infty) = U_i^{-1}(+\infty,-\infty) = U_i(-\infty,+\infty) \tag{46}$$

上式最后一步可参阅第八章§5.

如果 H 和 H_0 都具有时间反演不变性,则有①

$$U(T)H_i^I(t)U^{-1}(T) = H_i^I(-t) \tag{47}$$

由此可证明

$$U(T)SU^{-1}(T) = S^+ \tag{48}$$

事实上,由(44)式,有

$$\begin{cases} U(T)[i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U_i(t,t_0)]U^{-1}(T) = U(T)H_i^I(t)U^{-1}U(T)U_i(t,t_0)U^{-1}(T) \\ U(T)U_i(t_0,t_0)U^{-1}(T) = 1 \end{cases}$$

假定时间反演不变性成立,代入(47)式,则上式成为

$$\begin{cases} i\hbar\dfrac{\partial}{\partial(-t)}U(T)U_i(t,t_0)U^{-1}(T) = H_i^I(-t)U(T)U_i(t,t_0)U^{-1}(T) \\ U(T)U_i(t_0,t_0)U^{-1}(T) = 1 \end{cases}$$

将上式与(44)式比较可得

$$U(T)U_i(t,t_0)U^{-1}(T) = U(-t,-t_0)$$

---

① 参阅李政道著,场论与粒子物理学,上册§12.3,P.172.

因而有

$$U(T)U_i(\infty,-\infty)U^{-1}(T)=U_i(-\infty,\infty)$$

注意到(45)式和(46)式便得到(48)式. 这就是说,若 H 和 H_0 是 T 反演不变的,则相应的 S 矩阵的时间反演算符就是它的厄密共轭.

设$|i\rangle$,$|f\rangle$是 H_0 的本征态,相应的时间反演态为:

$$|i'\rangle=U(T)|i\rangle \tag{49}$$

$$|f'\rangle=U(T)|f\rangle \tag{50}$$

则由 $U(T)$的反幺正性及(48)式可证明

$$\begin{aligned}\langle i'|S|f'\rangle &=\langle U(T)i|S|U(T)f\rangle \\ &=\langle U(T)f|S^{+}|U(T)i\rangle^{*} \\ &=\langle U(T)f|S^{+}U(T)|i\rangle^{*} \\ &=\langle U(T)f|U(T)S|i\rangle^{*} \\ &=(\langle f|S|i\rangle^{*})^{*} \\ &=\langle f|S|i\rangle\end{aligned} \tag{51}$$

即

$$S_{i'f'}=S_{fi} \tag{51'}$$

这个关系称为精细平衡,有时称为微观可逆性(micro-reversibility).

由上式可得

$$T_{i'f'}=T_{fi} \tag{52}$$

$$w_{i\to f}=w_{f'\to i'} \tag{53}$$

可见,时间反转不变性的结果,使具有时间反转态参数的逆过程(inverse process)的跃迁几率与直接过程(direct process)的跃迁几率相同.

§8 全同粒子的交换对称性

上面讨论的都是关于时间和空间的对称变换. 此外,也还存在许多不属时空变换的对称性. 这些对称性的发现,又导致一些新的守恒定律或关于物理体系的新规律. §8—§11 分别介绍另外几

种对称变换.本节讨论全同粒子的交换对称性.

1. 全同粒子的不可区分性

自然界中存在各种不同类型的粒子,例如电子、质子、中子、光子、π介子等.每一类粒子都具有一定的内禀的客观属性.例如静质量、电荷、自旋、磁矩、寿命等.事实上,人们正是根据这些具有相对稳定性的客观属性来划分各种不同类型的粒子的.静质量、电荷、自旋等属性完全相同的粒子称为全同粒子(identical particles).由许多全同粒子组成的体系称为全同粒子体系(system of identical particles).例如原子和分子中的电子系,原子核中的质子系与中子系,金属中的电子气等.

在经典力学中,对全同粒子系的处理与不同粒子组成的体系完全相同.因为原则上我们可以给全同粒子系中每一个粒子以一定的标记,如根据不同轨道予以标记或区别.但是在量子力学中,上述标记法是不可能的.例如即使根据最初的动量和坐标对粒子加以区别,但由于微观粒子具有波动性这一特性,描写粒子的波包会扩散,粒子间几率的重迭(overlap)以至引起动量交换,最终仍然无法对各粒子加以区别.由此可见,在量子力学中,全同粒子具有不可区分性(indistinguishability),全同粒子的这种不可区分性,是微观粒子所具有的重要特性.

2. 交换对称性

由全同粒子的不可区分性立刻可以得到一个重要的结果,即所谓交换对称性:对于全同粒子系中任何两个粒子的交换,体系的哈密顿量是不变的.例如对于具有 Z 个电子的原子,

$$H = \sum_i \left(\frac{1}{2m}p_i^2 - \frac{Ze^2}{r_i}\right) + \frac{1}{2}\sum_i \sum_j \frac{e^2}{r_{ij}}$$

因 $r_{ij}=r_{ji}$,可见交换 i、j 两个粒子时 H 不变.一般地

$$H(q_1,\cdots,q_i,\cdots,q_j,\cdots,q_n) = H(q_1,\cdots,q_j,\cdots,q_i,\cdots,q_n) \quad (1)$$

我们可以引进交换算符 P_{ij},表示第 i 个粒子与第 j 个粒子互换它们的坐标和自旋宗量,即

$$P_{ij}\Phi(q_1,\cdots,q_i,\cdots,q_j,\cdots,q_n,t) = \Phi(q_1,\cdots,q_j,\cdots,q_i,\cdots,q_n,t) \quad (2)$$

式中 $q_i=(r_i,s_i)$. 因此，交换对称性又可表述为 H 与 P_{ij}对易，即

$$[P_{ij},H] = 0 \tag{3}$$

证明如下：

$$\begin{aligned}P_{ij}H\Phi &= P_{ij}(H(q_1,\cdots,q_i,\cdots,q_j,\cdots,q_n)\Phi(q_1,\cdots,q_i,\cdots,q_j,\cdots,q_n,t))\\ &= H(q_1,\cdots,q_j,\cdots,q_i,\cdots,q_n)\Phi(q_1,\cdots,q_j,\cdots,q_i,\cdots,q_n,t)\\ &= H(q_1,\cdots,q_i,\cdots,q_j,\cdots,q_n)P_{ij}\Phi(q_1,\cdots,q_i,\cdots,q_j,\cdots,q_n,t)\\ &= HP_{ij}\Phi\end{aligned}$$

由此得到

$$P_{ij}H = HP_{ij}$$

从而证明了(3)式. (3)式就是全同粒子不可区分性的数学表述.

可以证明，全同粒子的所有置换(permutation)组成一个群，叫做置换群(permutation group).

3. 交换简并

由于全同粒子的交换对称性，导致体系能级的简并. 这是因为如果 $\Phi(q_1,\cdots,q_i,\cdots,q_j,\cdots,q_n,t)$是薛定谔方程的解：

$$H\Phi(q_1,\cdots,q_i,\cdots,q_j,\cdots,q_n,t) = E\Phi(q_1,\cdots,q_i,\cdots,q_j,\cdots,q_n,t) \tag{4}$$

则由于 P_{ij}与 H 对易，$P_{ij}\Phi$ 也是薛定谔方程具有相同本征值 E 的解：

$$HP_{ij}\Phi = P_{ij}H\Phi = P_{ij}E\Phi = EP_{ij}\Phi \tag{5}$$

我们知道，n 个粒子的全部置换共有 $n!$ 种，因此，有 $n!$ 个波函数对应同一能量，这就是说，体系能级是 $n!$ 度简并的. 这种由于交换对称性引起的能级简并，称为交换简并(exchange degeneracy). 这样看来，全同粒子系的能级好象是高度简并的. 然而，事实上，并非所有这些简并态都是物理上允许的.

4. 全同性原理　对称的和反对称的波函数

由于全同粒子的不可区分性，使得在全同粒子系中，任何两个粒子的交换不会引起物理状态的改变. 这个论断称为全同性原理. 根据这个原理，全同粒子体系的波函数将具有特殊的性质.

两个粒子交换时

$$\begin{aligned}&\Phi(q_1,\cdots,q_i,\cdots,q_j,\cdots,q_n,t)\\ &\rightarrow P_{ij}\Phi(q_1,\cdots,q_i,\cdots,q_j,\cdots,q_n,t)\end{aligned}$$

$$=\Phi(q_j,\cdots,q_j,\cdots,q_i,\cdots,q_n,t)$$

而按照全同性原理，Φ 和 $P_{ij}\Phi$ 描述的是同一量子态，它们之间最多差一个常数因子 λ，即

$$P_{ij}\Phi=\lambda\Phi \tag{6}$$

用 P_{ij}再运算一次(再一次交换该两个粒子)，得

$$P_{ij}^2\Phi=\lambda P_{ij}\Phi=\lambda^2\Phi$$

但是，连续两次交换两个粒子等于不交换(还原)，所以

$$P_{ij}^2\Phi=\Phi$$

比较上面两式可得

$$\lambda^2=1$$

因而

$$\lambda=\pm 1 \tag{7}$$

即 P_{ij}只有两个本征值：$\lambda=\pm 1$. 这样，全同粒子系的波函数必须满足下列关系之一：

$$\left.\begin{aligned}P_{ij}\Phi_S&=\Phi_S\\P_{ij}\Phi_A&=-\Phi_A\end{aligned}\right\}\qquad i\neq j=1,2,\cdots,n \tag{8}$$

其中 Φ_S 称为对称波函数(symmetrical wave function)，Φ_A 称为反对称波函数(antisymmetrical wave function). 因此，描述全同粒子系状态的波函数只能是对称的 Φ_S 或反对称的 Φ_A. 并且，由于 P_{ij}与 H 对易，P_{ij}是一个守恒量，所以，波函数的交换对称性不随时间而改变. 如果体系在某一时刻处于对称(反对称)态，则它将永远处于对称(反对称)态上.

与其他对称性不同，在自然界中能实现的全同粒子系的波函数总是 P_{ij}的本征态(对称的或反对称的)，即总是具有确定的交换对称性. 然而，我们已经知道，一个具有空间反射对称性的体系，其所处状态并不一定是宇称的本征态，一个具有球对称性的体系，其所处的状态也并不一定是角动量的本征态.

上面提到并非所有交换简并的态都是物理上允许的，现在我们知道，这些简并态还要满足对称的要求(对称态或反对称态)，亦即这些简并态波函数还要满足波函数对称化的要求(对称波函数

或反对称波函数)，从而消除了交换简并[1]. 既然全同粒子系的波函数只能是对称的或反对称的，而且这种交换对称性又是守恒的，据此，微观粒子可分为两类：一类粒子由对称性波函数描写，另一类粒子由反对称波函数描写. 实验正好证明，具有整数自旋(integer spin)的粒子总是具有对称的态，即由对称波函数描写，它们遵守玻色-爱因斯坦统计(Bose-Einstein statistics)，称为玻色子(bosons)，例如 π 介子，光子，α 粒子. 而具有半奇数自旋的粒子总是具有反对称态，即用反对称波函数描写，它们遵守费米-狄喇克(Fermi-Dirac statistics)统计，称为费米子(fermions)，例如电子、质子、中子、中微子、μ 子等. 至今尚不能给出在自然界中为什么只有完全对称和完全反对称态出现的理由. 自旋与统计之间的联系首先由泡利在相对论性量子场论的相当普遍的假设基础上所证明.

§9 规范变换与电荷守恒

1. 规范变换和规范不变性

考察带电的粒子在电磁场中的哈密顿量

$$H = \frac{1}{2m}\left[p - \frac{e}{c}A(r,t)\right]^2 + e\varphi(r,t) + V(r,t) \tag{1}$$

其中 φ 和 A 分别为电磁场的标势和矢势，V 是作用在粒子上的所有其他势，p 为正则动量

$$\begin{aligned} p &= mV + \frac{e}{c}A \\ &= -i\hbar\nabla \end{aligned} \tag{2}$$

与时间有关的薛定谔方程是

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\psi(r,t)}{\partial t} &= H\psi(r,t) \\ &= \left(\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}A\right)^2 + e\varphi + V\right)\psi(r,t) \end{aligned} \tag{3}$$

---

① 参阅 Roman, Advanced Quantun Theoty, P. 57.

现在作洛仑兹规范变换或叫第二类规范变换(gauge transformation of the second kind)来改变势

$$\left.\begin{aligned} A \to A' &= A + \nabla f(r,t) \\ \varphi \to \varphi' &= \varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial f(r,t)}{\partial t} \end{aligned}\right\} \tag{4}$$

经过变换后,波函数将有所不同,因它必须满足下列方程:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi'(r,t) = H'\psi'(r,t) \tag{5}$$

式中
$$H' = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - \frac{e}{c}A'\right)^2 + e\varphi' + V(r,t) \tag{6}$$

除非 f 是个常数,这个方程不同于(3)式.因此,一般说来,函数 $\psi(r,t)$并不是一个规范不变量.但是,ψ 与 ψ'之间有一个非常简单的关系

$$\psi(r,t) \to \psi'(r,t) = e^{i\frac{e}{\hbar c}f(r,t)}\psi(r,t) \tag{7}$$

也可以称波函数的上述变换为第一类规范变换(gauge transformation of the first kind).容易证明,如果 ψ 是(3)式的解,则由(7)式定义的 ψ'必满足(5)式,因而规范变换的效果是改变波函数的相因子,它是位置的一个函数.为证明这点,计算

$$\nabla\psi' = e^{i\frac{e}{\hbar c}f}\left(\nabla\psi + i\frac{e}{\hbar c}\psi\nabla f\right)$$

$$\nabla^2\psi' = e^{i\frac{e}{\hbar c}f}\left[\nabla^2\psi + 2i\frac{e}{\hbar c}\nabla\psi\cdot\nabla f + i\frac{e}{\hbar c}\psi\nabla^2 f - \frac{e^2}{\hbar^2c^2}(\nabla f)^2\psi\right]$$

$$\frac{\partial\psi'}{\partial t} = e^{i\frac{e}{\hbar c}f}\left(\frac{\partial\psi}{\partial t} + i\frac{e}{\hbar c}\psi\frac{\partial f}{\partial t}\right)$$

把以上诸式和(4)式以及(1)式的展开式

$$H' = -\frac{\hbar_2}{2m}\nabla^2 + i\frac{e\hbar}{mc}\left(A'\cdot\nabla + \frac{1}{2}\nabla\cdot A'\right) + \frac{e^2}{2mc^2}A'^2 + e\varphi' + V \tag{8}$$

代入(5)式,得

$$i\hbar e^{i\frac{e}{\hbar c}f}\left(\frac{\partial\psi}{\partial t} + i\frac{e}{\hbar c}\psi\frac{\partial f}{\partial t}\right)$$

$$=[-\frac{\hbar_2}{2m}\nabla^2+i\frac{e\hbar}{mc}(A'\cdot\nabla+\frac{1}{2}\nabla\cdot A')+\frac{e^2}{2mc^2}A'^2+e\varphi'+V]e^{i\frac{e}{\hbar c}f}\psi$$

$$=e^{i\frac{e}{\hbar c}f}\{-\frac{\hbar_2}{2m}[\nabla^2\psi+2i\frac{e}{\hbar c}\nabla\psi\cdot\nabla f+i\frac{e}{\hbar c}\psi\nabla^2 f-\frac{e^2}{\hbar^2c^2}(\nabla f)^2\psi]$$

$$+i\frac{e\hbar}{mc}[A\cdot\nabla\psi+i\frac{e}{\hbar c}\psi A\cdot\nabla f+\nabla f\cdot\nabla\psi+i\frac{e}{\hbar c}\psi(\nabla f)^2$$

$$+\frac{1}{2}\psi\nabla\cdot A+\frac{1}{2}\psi\nabla^2 f]+\frac{e^2}{2mc^2}[A^2+2A\cdot\nabla f+(\nabla f)^2]\psi$$

$$+(e\varphi-\frac{e}{c}\frac{\partial f}{\partial t})\psi+V\psi\}$$

整理后得 $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=H\psi$. 这就证明了在规范变换下,由(7)式联系的 ψ 和 ψ' 分别是(3)式和(5)式的解. 这样,我们就证明了在规范变换下薛定谔方程的不变性.

虽然波函数在规范变换下改变了,但是所有的物理上可观察量在规范变换下都不变. 容易证明,诸如 r 和 H 之类的规范不变算符的矩阵元在规范变换下是不变的,但正则动量 $p=\frac{\hbar}{i}\nabla$ 的矩阵元在规范变换下要改变,所以 p 就不是一个真正的可观察量. 而速度

$$v=\frac{1}{m}(p-\frac{e}{c}A)$$

的矩阵元在规范变换下不变.

事实上,算符 A 的矩阵元定义为

$$\langle m|A|n\rangle=\int d^3r\psi_m^*A\psi_n$$

$$\langle m|A|n\rangle'=\int d^3r\psi_m'^*A\psi_n'$$

如果 ψ' 和 ψ 由(7)式联系,则可证明

$$\langle m|r|n\rangle'=\langle m|r|n\rangle \tag{9}$$

$$\langle m|p|n\rangle'=\langle m|p|n\rangle+\frac{e}{c}\langle m|\nabla f|n\rangle \tag{10}$$

$$\langle m|v|n\rangle'=\langle m|v|n\rangle \tag{11}$$

$$\langle m|H|n\rangle' = \langle m|H|n\rangle \tag{12}$$

2. 规范不变性与电荷守恒定律

因为我们知道，前面讨论过的守恒定律是与平移、旋转和反演下的不变性联系在一起的，这就自然要问，是否有某种守恒定律与规范不变性联系在一起？回答是：一般认为电荷守定律是与规范不变性相联系的守恒定律①. 由(7)式可知，规范变换只是对态矢量乘以一个相因子，因此很明显，在规范变换下几率密度不变，即

$$\rho' = \psi'^*\psi' = \psi^*\psi = \rho \tag{13}$$

以电荷 e 乘 ρ 得电荷密度 $\rho_e = e\rho = e\psi^*\psi$，故有

$$\rho_e' = \rho_e \tag{14}$$

上式自然表示电荷守恒.

另方面，我们从连续性方程的规范不变性亦可证明电荷守恒.

电荷为 e 的粒子在电磁场中的薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + i\frac{e\hbar}{mc}\left(\mathbf{A}\cdot\nabla + \frac{1}{2}\nabla\cdot\mathbf{A}\right)\psi + \left(\frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2 + e\varphi + V\right)\psi \tag{15}$$

其共轭方程为

$$-i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^* - i\frac{e\hbar}{mc}\left(\mathbf{A}\cdot\nabla + \frac{1}{2}\nabla\cdot\mathbf{A}\right)\psi^* + \left(\frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2 + e\varphi + V\right)\psi^* \tag{16}$$

(15)式乘以 ψ^*，(16)式乘以 ψ，然后相减，得

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}(\psi^*\psi) = -\frac{\hbar^2}{2m}(\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*) + i\frac{e\hbar}{mc}[\mathbf{A}\cdot\nabla(\psi^*\psi) + \psi^*\psi\nabla\cdot\mathbf{A}] \tag{17}$$

注意到

$$\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^* = \nabla\cdot(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)$$

---

① 用另一种方式表述电荷守恒可参阅《亚原子物理学》(中译本) §7.2, P.113.

$$A \cdot \nabla(\psi^* \psi) + \psi^* \psi \nabla \cdot A = \nabla \cdot (A\psi^* \psi)$$

于是由(17)式得到连续性方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot S = 0 \tag{18}$$

其中 S 表示几率流密度

$$S = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi + 2i \frac{e}{\hbar c} A \psi^* \psi\right) \tag{19}$$

在规范变换(4)式和(7)式下,几率流密度为

$$\begin{aligned} S' &= \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi' \nabla \psi'^* - \psi'^* \nabla \psi' + 2i \frac{e}{\hbar c} A' \psi'^* \psi'\right) \\ &= \frac{i\hbar}{2m}\Big[\psi\left(\nabla \psi^* - i \frac{e}{\hbar c} \psi^* \nabla f\right) - \psi^*\left(\nabla \psi + i \frac{e}{\hbar c} \psi \nabla f\right) \\ &\quad + 2i \frac{e}{\hbar c}\left(A \psi^* \psi + \psi^* \psi \nabla f\right)\Big] \\ &= \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi + 2i \frac{e}{\hbar c} A \psi^* \psi\right) = S \end{aligned} \tag{20}$$

可见在规范变换下,几率流密度也不变.于是便得到:

$$\frac{\partial \rho'}{\partial t} + \nabla \cdot S' = 0 \tag{21}$$

即连续性方程具有规范不变性.将(18)式和(21)式乘以电荷 e,便得到电荷守恒不因规范变换而改变.

§10　电 荷 共 轭

电荷共轭(charge conjugation)变换是把粒子变成反粒子,或者相反,即

$$\text{粒子} \overset{c}{\leftrightarrow} \text{反粒子}$$

因为粒子和反粒子的电荷 q 反号,故

$$q \overset{c}{\leftrightarrow} -q \tag{1}$$

显然,与空间反射和时间反转变换一样,电荷共轭变换与恒等变换也组成二阶阿贝尔群.

我们用态矢$|N\rangle$描述一个粒子，这里N代替相加性量子数q、(电荷)、B(重子数)、S(奇异数)、L(轻子数)、μ(μ子数)．用$U(C)$记变换C的幺正表示，则电荷共轭运算可定义为

$$U(C)|N\rangle = |-N\rangle \tag{2}$$

电荷共轭改变了这些相加性量子数的符号，而保持动量和自旋不变．为了表示不仅电荷变号，而且重子数、奇异数、轻子数和μ子数也改变符号，有时把C称为粒子-反粒子共轭变换．图6-3描述了带电粒子穿越电场的情况，作用在整个系统上的电荷共轭改变了粒子的相加性量子数，而保持时空性质($\boldsymbol{P}\cdot\boldsymbol{J}$)不变，外场的电荷也倒过来了，所以粒子和反粒子的轨道是相同的．

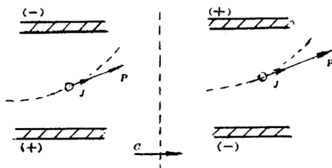


图6-3

将$U(C)$再对(2)式作用一次，就重新得到原来的态，即

$$U^2(C)|N\rangle = U(C)|-N\rangle = |N\rangle$$

所以
$$U^2(C) = 1 \tag{3}$$

从而得到$U(C)$的本征值为

$$\lambda_C = \pm 1 \tag{4}$$

λ_C称为电荷宇称(或电荷共轭量子数)．它也是相乘性量子数．

电荷共轭算符$U(C)$和宇称算符$U(I)$一样，它既是幺正的又是厄密的．但是，$U(C)$和$U(I)$之间有着重要的区别，因为$U(C)$并不总有本征态．为了研究这个新特点，我们试写下：

$$U(C)|N\rangle \overset{?}{=} \lambda_C|N\rangle \tag{5}$$

并询问这样的关系在什么情况下才有意义．作为例子，取态$|N\rangle$为

电荷算符 Q 的本征态 $|q\rangle$，于是有

$$Q|q\rangle = q|q\rangle \tag{6}$$

但由于(2)式，有

$$U(C)|q\rangle = |-q\rangle \tag{7}$$

于是我们有

$$U(C)Q|q\rangle = qU(C)|q\rangle = q|-q\rangle$$

$$QU(C)|q\rangle = Q|-q\rangle = -q|-q\rangle$$

由此两式可得

$$(U(C)Q - QU(C))|q\rangle = 2q|-q\rangle$$
$$= 2U(C)Q|q\rangle$$

$$[U(C), Q] = 2U(C)Q \tag{8}$$

可见算符 $U(C)$ 与 Q 不对易，因此，一般说来，不可能找到一个状态，同时为这两个算符的本征态. 一个带电粒子，不可能满足(5)式那样的本征方程，这是因为自然界已经选择了粒子为 Q 的本征态. 以上讨论也可适用于重子数 B 和超荷 Y. 自然界中出现的粒子是 B 和 Y 的本征态，并且 B 或 Y 也不与 $U(C)$ 对易. 然而有一例外，纯中性粒子(purely neutral particle)(即 $q=B=Y=0$ 的粒子)可以是 $U(C)$ 的本征态. 因为 $|q=B=Y=0\rangle$ 和 $U(C)|q=B=Y=0\rangle$ 具有相同的相加性量子数，即都为零. 对于这样的粒子，(5)式成立：

$$U(C)|N=0\rangle = \lambda_C|N=0\rangle, \quad \lambda_C = \pm 1 \tag{9}$$

但是，并不是所有中性粒子都有确定的电荷宇称，它们的反粒子不同于其自身. 例如中子和反中子，虽然它们的几乎所有特征量相同，但它们的磁矩与自旋分别平行和反平行.

对于有确定电荷宇称的中性粒子，由于在 C 变换下不变，这样的粒子与其反粒子完全没有区别. 例如光子，π^0 介子和 η^0，它们的电荷宇称 λ_C 可由实验分析得出. 例如光子，用矢势 A 描述，由于它是电荷和电流产生的，所以在 C 变换下改变符号：

$$\boldsymbol{A} \xrightarrow{C} -\boldsymbol{A} \tag{10}$$

由此可取

$$\lambda_C(\gamma) = -1 \tag{11}$$

而 π^0 和 η^0 通过电磁衰变为两个光子：

$$\pi^{\circ} \to 2\gamma, \quad \eta^{\circ} \to 2\gamma$$

因此，若衰变过程中$U(C)$守恒，则它们必须有正的C字称：

$$\lambda_C(\pi^{\circ}) = 1, \quad \lambda_C(\eta^{\circ}) = 1 \tag{12}$$

用电荷字称来讨论衰变，就要求λ_C是一个好量子数. 如果$U(C)$与哈密顿量对易，则它是守恒量，因而λ_C是好量子数. 实验表明，电荷共轭算符$U(C)$在电磁作用和强作用中是守恒的：

$$[U(C), H_{电}] = 0 \tag{13}$$

$$[U(C), H_{强}] = 0 \tag{14}$$

但是，在弱作用中，$U(C)$不守恒，即

$$[U(C), H_{弱}] \neq 0 \tag{15}$$

实验指出，在弱作用下，$U(C)$和$U(I)$分别不守恒. 曾经出现过电荷共轭C和字称P联合作用下不变性的理论，但1964年中性K介子衰变中观察到CP破坏(violation).

在量子场论中，有一个著名的CPT定理，即电荷共轭C，字称P和时间反转T三种运算的乘积与H对易：

$$[CPT, H] = 0 \tag{16}$$

与C、P、T的作用次序无关，换句话说，在C、P、T的联合作用下，CPT总是守恒的.

既然弱作用的中性K介子衰变中观察到CP不守恒，则根据CPT定理，T也应该不守恒，否则就是CPT定理错了. 目前，多数实验支持CPT定理，这样一来，在K°介子衰变中，时间反转不变性的破坏似乎已被确定，而这种破坏的原因仍然不清楚. 但是，尽管作了巨大的努力，仍然没有在任何其他系统中找到CP或T破坏的证据.

§11 同位旋空间中的转动对称性与同位旋守恒

1. 电荷无关性和同位旋

(1) 电荷无关性

人们早已熟知，质子(proton)和中子(neutron)除了电荷和磁矩

不一样外，两者的质量极接近，而自旋和宇称则相同. 同时，在复合核(complex nuclei)中，质子和中子几乎起着对称的作用，核的结合能(binding energy)接近正比于质子数与中子数之和，而对较轻的核，质子数与中子数几乎相同. 特别是，散射实验显示出质子-质子，中子-中子，质子-中子间强作用的核力具有相同的强度，这就是核力的电荷无关性(charge independence of the nuclear forces). 今天，电荷无关性的实验证据非常有力，并且已经知道，不仅核子间的强作用力，而且所有的强子(hadrons)作用力都是电荷无关的.

核力的电荷无关性导致了一个新的守恒量子数——同位旋的引入. 同位旋的概念是海森堡首先提出的，早在 1932 年，他就把中子和质子当作一种粒子——核子(nucleon)的两种电荷态来处理，或者说它们组成同位旋空间的二重态(isodoublet). 如果没有电磁作用，这两种态大概就会有相同的质量，但是电磁作用的存在使得它们的质量有轻微的差别. π 介子(pions)发现后，费米又把同位旋概念推广用于 π 介子，认为 π^+、π^0、π^- 组成一组同位旋三重态(isotriplet).

(2) 核子的同位旋

为了描述核子的两种态，引入抽象的同位旋空间(abstract isospace)，或电荷空间，并将它与自旋为$\frac{1}{2}$的粒子的两种自旋态进行类比. 在同位旋空间中，形式上引入一个新的矢量——同位旋(siospin)$\boldsymbol{I}$，它在此空间中的取向有 $2I+1$ 种，即它在任意轴上的投影可取 $2I+1$ 个可能值：$-I,-I+1,\cdots,I-1,I$. 同位旋矢量 $\boldsymbol{I}$ 的三个分量记为 I_1，I_2 和 I_3. 核子的同位旋在同位旋空间里具有 $2I+1=2$ 个可能取向(分别对应质子态和中子态). 可见 $I=\frac{1}{2}$. 我们约定用同位旋第三分量 I_3 来区分质子和中子：$I_3=+\frac{1}{2}$的态描述

质子，$I_3=-\frac{1}{2}$的态描述中子①. 核子的同位旋态可用狄喇克态矢表示为$|I,I_3\rangle$，于是同位旋矢量 I 及其第三分量的本征方程为

$$I_{op}^2|I,I_3\rangle = I(I+1)|I,I_3\rangle$$

$$I_{3op}|I,I_3\rangle = I_3|I,I_3\rangle$$

式中下标 OP 表示算符，在不致混淆的地方可以省略不写. 对核子，有

$$I^2|\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{2}\times(\frac{1}{2}+1)|\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}\rangle = \frac{3}{4}|\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}\rangle$$

$$I_3|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{2}|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle \quad (质子) \tag{1}$$

$$I_3|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle = -\frac{1}{2}|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle \quad (中子) \tag{2}$$

核子的电荷算符定义为

$$Q = e(I_3+\frac{1}{2}) \tag{3}$$

由此可得到质子电荷为 e，中子电荷为零.

我们也可以象电子自旋态的描述方法那样，用二分量函数来描述核子更为方便. 我们可以取

$$\varphi_p = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \qquad \varphi_n = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \tag{4}$$

分别描述质子和中子的同位旋态. 同位旋第三分量 I_3 选取为

$$I_3 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix} \tag{5}$$

则容易得到

$$I_3\varphi_p = \frac{1}{2}\varphi_p, \qquad I_3\varphi_n = -\frac{1}{2}\varphi_n \tag{6}$$

与(2)式等价，即用 I_3 的本征值$\pm\frac{1}{2}$来区分核子的不同电荷态(质

---

① 在原子核物理学中，经常把同位旋叫做同量异位旋(isobaric spin)，并取中子的 $I_3=\frac{1}{2}$，质子的 $I_3=-\frac{1}{2}$.

子态和中子态).

现在我们来构造算符,它把质子变换为中子,或者相反.这样的变换在 β 衰变过程中已经出现,显然,如果我们取

$$I_+ = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad I_- = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{7}$$

则容易得到

$$\left.\begin{aligned} I_+\varphi_p = 0, \qquad I_+\varphi_n = \varphi_p \\ I_-\varphi_p = \varphi_n, \qquad I_-\varphi_n = 0 \end{aligned}\right\} \tag{8}$$

由上式可见,I_+和 I_-能使核子的两种状态互相转化.I_+是电荷的产生算符,它把核子从中子态变换为质子态;I_-是电荷的消灭算符,它把核子从质子态变换为中子态.

注意,I_+和 I_-是奇异的(singular)和非厄密的,但它们的如下线性组合则是厄密的:

$$I_1 = (I_+ + I_-) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{9}$$

$$I_2 = -i(I_+ - I_-) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{10}$$

(9)式、(10)式和(5)式与泡利自旋矩阵相似,容易证明,I_1、I_2、I_3 具有与自旋算符相同的对易关系:

$$[I_j, I_k] = i\epsilon_{jkl} I_l \tag{11}$$

(3) π 介子的同位旋

对于 π 介子,有 π^+、π^0、π^-三种,它们的质量几乎相等,许多性质相同,但具有不同的电荷,也可以把它们看作是一种粒子的三种不同的电荷状态.故同位旋矢量 T 在抽象的三维同位旋空间的取向有 3 个可能值,即 $2T+1=3$,于是得到 $T=1, T_3=1,0,-1$.如 π 介子的同位旋态用 $|T,T_3\rangle$ 表示,则 T_3 的本征方程为

$$T_3|1,1\rangle = |1,1\rangle \quad (\pi^+ \text{介子}) \tag{12}$$

$$T_3|1,0\rangle = 0 \quad (\pi^0 \text{介子}) \tag{13}$$

$$T_3|1,-1\rangle = -|1,-1\rangle \quad (\pi^- \text{介子}) \tag{14}$$

π 介子的电荷算符为

$$Q = eT_3 \tag{15}$$

如果我们用三分量的函数来描述 π 介子的态，则可取

$$\varphi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \varphi_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \varphi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{16}$$

分别表示 π^+、π^0 和 π^- 介子. 引进 π 介子的电荷产生与电荷消灭算符

$$T_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad T_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{17}$$

容易证明：

$$\left.\begin{aligned} T_+ \varphi_+ = 0, \quad T_+ \varphi_0 = \varphi_+, \quad T_+ \varphi_- = \varphi_0 \\ T_- \varphi_+ = \varphi_0, \quad T_- \varphi_0 = \varphi_-, \quad T_- \varphi_- = 0 \end{aligned}\right\} \tag{18}$$

由 T_+和 T_-的组合可得到厄密算符

$$T_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(T_+ + T_-) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{19}$$

$$T_2 = \frac{-i}{\sqrt{2}}(T_+ - T_-) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \tag{20}$$

$$T_3 = T_+ T_- - T_- T_+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{21}$$

显然有

$$T_3\varphi_+ = \varphi_+, \quad T_3\varphi_0 = 0, \quad T_3\varphi_- = -\varphi_- \tag{22}$$

它与(12)、(13)、(14)诸式一致，即用同位旋第三分量来区分 π 介子的不同电荷状态(π^+、π^0、π^-).

(4) 体系的同位旋

对于核子-核子体系，总同位旋 $\boldsymbol{I}$ 为

$$\boldsymbol{I} = \boldsymbol{I}^{(1)} + \boldsymbol{I}^{(2)} \tag{23}$$

由于 $I^{(1)}=I^{(2)}=\frac{1}{2}$，象两个自旋角动量耦合的性质一样，$I=1$ 或 0. 对于 $I=1$，$I_3=1,0,-1$，因而有同位旋三重态. 对于 $I=0$，$I_3=0$，因而是同位旋单态.

对于核子-介子体系，其同位旋性质亦由总同位旋

$$\boldsymbol{\tau}=\boldsymbol{I}+\boldsymbol{T} \tag{24}$$

及其第三分量 τ_3 表征. 总同位旋的性质与两个角动量耦合的总角动量的性质相似，同样可获得各组同位旋多重态.

2. 同位旋不变性与同位旋守恒

上面我们看到，由于同位旋的引入，可以把中子和质子作为一种粒子的两个态来描述. 电荷无关性表明，强作用力不能区别质子和中子，因而，仅存在强作用时，同位旋矢量 $\boldsymbol{I}$ 可指向任意方向(同位旋空间各向同性)；换句话说，存在着同位旋空间的旋转不变性，即绕任意方向转动下体系不变，可表示为

$$[H_k,\boldsymbol{I}]=0 \tag{25}$$

由此可见，同位旋是守恒的. 因为仅仅存在 H_k，具有不同 I_3 值的 $2I+1$ 个态是简并的，它们具有相同的能量(质量). 因此，如果只存在强作用，中子和质子就会有相同的质量. 电磁作用破坏了同位旋的各向同性，这种对称性的破坏意味着

$$[H_k+H_{em},\ \boldsymbol{I}]\neq 0 \tag{26}$$

但是，即使 H_{em}存在，电荷也总是守恒的：

$$[H_k+H_{em},\ Q]=0 \tag{27}$$

其中 Q 是电荷算符. 注意到(3)式，则由上式得到

$$[H_k+H_{em},\ I_3]=0 \tag{28}$$

因此，即使在电磁作用存在时，同位旋第三分量仍然守恒，即绕第三轴转动下体系仍然不变. 这与普通三维各向同性空间中角动量 $\boldsymbol{J}$ 守恒

$$[H_0,\boldsymbol{J}]=0$$

但外磁场破坏了各向同性

$$[H_0+H_{mag},\ \boldsymbol{J}]\neq 0$$

而仍然保持绕 z 轴转动的不变性

$$[H_0 + H_{mag}, J_3] = 0$$

的情形相类似.

电荷无关性不仅对核子,而且对所有强子都成立,因而所有强子都具有同位旋不变性(isospin invariance)和同位旋守恒定律.

上面我们看到,在强作用下,同位旋不变性和同位旋守恒定律成立,但是,电磁作用破坏了这种对称性,使之成为近似的对称性,可称为破缺对称性. 相反地,连续时空变换对称(相应于能量、动量、角动量守恒)和全同粒子的交换对称性(相应于玻色-爱因斯坦统计和费米-狄喇克统计),则称为严格对称性,因为它们是在任何情况下普遍存在的对称性.

§12 能级简并与对称性的关系

以上我们讨论了守恒定律与对称性的深刻联系. 从本节开始,我们将讨论对称性的另一重要的结果,即体系能级简并与体系对称性的关系.

1. 关于能级简并的定理

设体系在对称性变换 Q 之下具有不变性,即

$$[H, Q] = 0 \tag{1}$$

若 ψ 是 H 的本征态

$$H\psi = E\psi \tag{2}$$

则由(1)式有

$$HQ\psi = QH\psi = QE\psi = EQ\psi \tag{3}$$

可见 ψ 和 $Q\psi$ 都是 H 属于能量为 E 的本征态. 于是,有两种可能:

(1) 若 $Q\psi$ 与 ψ 表示同一状态,即 $Q\psi = \lambda\psi$,也就是说,ψ 不仅是 H 的本征态,同时又是 Q 的本征态,则能级不简并(nondegenerate or no degeneracy).

(2) 若 $Q\psi$ 与 ψ 表示不同的状态,即它们彼此线性无关,则能级是简并的(degenerate).

关于判断一个体系的能级是否简并，量子力学中有一条定理：

设一个体系有两个彼此不对易的守恒量 F 和 G，即$[H,F]=0$，$[H,G]=0$，但$[F,G]\neq 0$，则一般说来(个别特殊的态除外)，体系的能级是简并的．证明如下：由于$[H,F]=0$，H，F 有共同本征态，即有

$$H\psi = E\psi \tag{4}$$

$$F\psi = F'\psi \tag{5}$$

又由$[H,G]=0$，有

$$HG\psi = GH\psi = GE\psi = EG\psi \tag{6}$$

将(4)式与(6)式对比(2)式与(3)式可看出，$G\psi$ 和 ψ 都是 H 的本征态，具有相同的能量 E．下面进一步证明 $G\psi$ 和 ψ 并不表示同一量子态．因而出现能级简并．事实上，由于$[F,G]\neq 0$，所以，除了满足 $G\psi=F\psi=0$ 的特殊态之外，一般说来

$$FG\psi \neq GF\psi = GF'\psi = F'G\psi$$

即 $F(G\psi)\neq F'(G\psi)$，可见 $G\psi$ 不是 F 属于本征值 F' 的本征态，而上面已证明 ψ 是 F 属于本征值 F' 的本征态(见(5)式)，由此得出结论，ψ 和 $G\psi$ 不是同一个态，即 $G\psi$ 和 ψ 是彼此独立的，但已证明 $G\psi$ 和 ψ 是 H 属于同一能量的本征态，所以体系能级至少是两重简并的．

可以证明，一维束缚定态能级总是不简并的．例如谐振子势和对称方势阱中运动的粒子，由于具有左右对称性，宇称是守恒量，但找不到与宇称不对易的守恒量，即不存在两个彼此不对易的守恒量，故能级是不简并的．

对于中心场中的粒子，由于势具有球对称性，角动量三个分量都是守恒量，但它们三者彼此不对易，因而除 $l=0$ 外，能级总是简并的．事实上，简并度为 $2l+1$．

由上面讨论可知，体系能级简并总是与体系的某种对称性有关，但对称性并不一定导至简并．

2．对称性群与简并

现在我们从群论的观点来讨论简并问题．

让我们考虑哈密顿算符的本征方程

$$H|\Phi\rangle = \lambda|\Phi\rangle \tag{7}$$

(也可以更一般地考虑可观察量 A). 假定体系具有某种对称性,对称性群记为 $G=\{g_0,g_1,\cdots,g_a,\cdots\}$. 体系的不变性意味着在希尔伯特空间中存在幺正算符 $U(a)$,它是群元素 g_a 在希尔伯特空间的表示式,它使态矢量 Φ 和算符 A 作如下变换:

$$|\Phi\rangle \xrightarrow{g_a} |\Phi'\rangle = U(a)|\Phi\rangle \tag{8}$$

$$A \xrightarrow{g_a} A' = U(a)AU^{+}(a) \tag{9}$$

由于体系具有对称性,一般说来,问题(7)式的本征值是简并的. 如果简并度为 f,则态矢 $|\Phi_{\lambda_1}\rangle,|\Phi_{\lambda_2}\rangle,\cdots\cdots,|\Phi_{\lambda_f}\rangle$ 都属于相同的能量 λ,即

$$H|\Phi_{\lambda_i}\rangle = \lambda|\Phi_{\lambda_i}\rangle,\quad i=1,2,\cdots,f \tag{10}$$

这些矢量组成就本征值 λ 而言的完全集(complete set). 这是因为 H 是厄密的,本征态矢可以正交归一化,而在有限维的空间中,正交归一性就意味着完全性(completeness). 于是,这些简并的本征矢量 $|\Phi_{\lambda_i}\rangle$ 张开一个希尔伯特空间的子空间,子空间的维数是 f 维的. 任何属于给定 H 的本征值 λ 的态都可表为 $|\Phi_{\lambda_i}\rangle$ 的线性组合($i=1,2,\cdots,f$).

由于体系具有对称性,H 在对称性群 G 下是不变的可观察算符,即

$$[U(a),H]=0 \tag{11}$$

将 $U(a)$ 作用于(10)式,利用(11)式便得

$$HU(a)|\Phi_{\lambda_i}\rangle = \lambda(U(a)|\Phi_{\lambda_i}\rangle) \tag{12}$$

于是我们看到,$U(a)|\Phi_{\lambda_i}\rangle$ 与 $|\Phi_{\lambda_i}\rangle$ 都是具有相同的能量本征值 λ 的薛定谔方程的解. 考虑到 $|\Phi_{\lambda_i}\rangle$ 的完全性,我们有

$$U(a)|\Phi_{\lambda_i}\rangle = \sum_{k=1}^{f} D_{\lambda_k\lambda_i}(a)|\Phi_{\lambda_k}\rangle \tag{13}$$

式中 $D_{\lambda_k\lambda_i}$ 是展开系数. 这就是说,在对称性群 G 的元素 g_a 变换下,完全集 $\{|\Phi_{\lambda_i}\rangle\}$ 中的元素在它们自身之间作线性变换. 这样一来,H

的不同的可能本征值 λ 确定希尔伯特空间的各个不变子空间. 每一个子空间 $\mathscr{H}_\lambda$ 由 H 属于给定本征值 λ 的线性独立的、正交的本征矢所张开.

下面我们来证明, $\{D(\alpha)\}$ 构成对称性群 G 的一个 f 维表示.

我们考虑另一群元素 $g_\gamma = g_\beta g_\alpha$, 则由(13)式有

$$U(\gamma)|\Phi_{\lambda_i}\rangle = \sum_{j=1}^{f} D_{\lambda_j\lambda_i}(\gamma)|\Phi_{\lambda_j}\rangle \tag{14}$$

式中 $D_{\lambda_j\lambda_i}(\gamma)$ 是另一组系数. 另一方面, 对(13)式作变换 g_β(这实质上是对体系先施行 g_α 变换, 继而施行 g_β 变换), 并重复利用(13)式, 得

$$\begin{aligned} U(\beta)U(\alpha)|\Phi_{\lambda_i}\rangle &= U(\beta)\sum_{k=1}^{f} D_{\lambda_k\lambda_i}(\alpha)|\Phi_{\lambda_k}\rangle \\ &= \sum_{k=1}^{f} D_{\lambda_k\lambda_i}(\alpha)U(\beta)|\Phi_{\lambda_k}\rangle \\ &= \sum_{k=1}^{f} D_{\lambda_k\lambda_i}(\alpha)\sum_{j=1}^{f} D_{\lambda_j\lambda_k}(\beta)|\Phi_{\lambda_j}\rangle \\ &= \sum_{k=1}^{f}\sum_{j=1}^{f} D_{\lambda_j\lambda_k}(\beta)D_{\lambda_k\lambda_i}(\alpha)|\Phi_{\lambda_j}\rangle \end{aligned} \tag{15}$$

如果把 f^2 个数 $D_{\lambda_a\lambda_b}$(其中 $a,b=1,2,\cdots,f$)看作是 $f\times f$ 矩阵的元素, 则上式可重写成

$$U(\beta)U(\alpha)|\Phi_{\lambda_i}\rangle = \sum_{j=1}^{f}[D(\beta)D(\alpha)]_{\lambda_j\lambda_i}|\Phi_{\lambda_j}\rangle \tag{16}$$

因为集合 $\{U(\alpha)\}$ 是群 G 在全希尔伯特空间的表示, 故 $U(\gamma)=U(\beta)U(\alpha)$, 即(14)式和(16)式左边相等, 因而两式右边也相等, 故

$$D_{\lambda_j\lambda_i}(\gamma) = [D(\beta)D(\alpha)]_{\lambda_j\lambda_i} \tag{17}$$

写成矩阵形式为

$$D(\gamma) = D(\beta)D(\alpha) \tag{18}$$

由于 $g_\gamma = g_\beta g_\alpha$ 是群元素的组合律, 故上式表明, $f\times f$ 矩阵的集合 $\{D(\alpha)\}$ 构成对称性群的一个 f 维表示, 即希尔伯特空间的不变子空间 $\{|\Phi_{\lambda_i}\rangle\}$ 荷载(carry)对称性群的一个表示, 此表示的元素是 f 维矩阵 $D(\alpha), D(\beta), \cdots$, 其矩阵元由(13)式确定, 例如

$$D_{\lambda_i\lambda_j}(a) = (\Phi_{\lambda_i}, U(a)\Phi_{\lambda_j}) \tag{19}$$

容易证明，这个表示是幺正的，即是每一个矩阵 $U(a)$ 都是幺正矩阵. 由正交性关系

$$(\Phi_{\lambda_i}, \Phi_{\lambda_j}) = \delta_{ij} \tag{20}$$

出发，考虑到通过变换 g_a，应不改变物理体系的本质，因而必有

$$(U(a)\Phi_{\lambda_i}, U(a)\Phi_{\lambda_j}) = \delta_{ij} \tag{21}$$

将(13)式代入上式得

$$\begin{aligned}
\delta_{ij} &= \sum_{k,l}(D_{\lambda_k\lambda_i}(a)\Phi_{\lambda_k}, D_{\lambda_l\lambda_j}(a)\Phi_{\lambda_l}) \\
&= \sum_{k,l}(D^*_{\lambda_k\lambda_i}(a)D_{\lambda_l\lambda_j}(a)(\Phi_{\lambda_k}, \Phi_{\lambda_l}) \\
&= \sum_{k,l}(D^*_{\lambda_k\lambda_i}(a)D_{\lambda_l\lambda_j}(a)\delta_{\lambda_k\lambda_l} \\
&= \sum_{k}(D^*_{\lambda_k\lambda_i}(a)D_{\lambda_k\lambda_j}(a) \\
&= \sum_{k}(D^+_{\lambda_i\lambda_k}(a)D_{\lambda_k\lambda_j}(a) \\
&= [D^+ (a)D(a)]_{\lambda_i\lambda_j}
\end{aligned} \tag{22}$$

于是得到

$$D^+ (a)D(a) = E \tag{23}$$

又因为 $D(a)$ 是有限维的，所以 $D(a)$ 就是幺正矩阵.

从上面的讨论我们可以得出结论，对称性的重要性反映在能量的本征态可以按照对称性群不可约表示来分类(label or classification)，标志不可约表示的指标可以作为描述体系状态的好量子数；而研究不可约表示的维数对于研究体系能级简并度是很有用的，因为能级简并度等于不可约表示的维数.

一个特殊情形，就是对于属于对称性群 G 的全部变换 g_a，存在

$$U(a)|\Phi_\lambda\rangle = c|\Phi_\lambda\rangle, \quad c = \text{const.} \tag{24}$$

即 $|\Phi_\lambda\rangle$ 不仅是 H 属于能量本征值 λ 的本征矢，同时还是相应的守恒量 $U(a)$(或其无穷小算符)的本征矢，这时 $U(a)|\Phi_\lambda\rangle$ 和 $|\Phi_\lambda\rangle$ 表示同一个状态，于是能级不是简并的. (24)式就是(13)式 $f=1$ 的特

殊情形，因而构成一维不变子空间，荷载对称性群的一维表示. 因为阿贝尔群的所有不可约表示都是一维的，所以，体系的对称性群是阿贝尔群时，能级是不简并的.

例如一维谐振子

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

H 对空间反射是对称的，即

$$[H,U(I)]=0$$

已知空间反射群是阿贝尔群，(24)式成立，即 H 的本征矢也是 $U(I)$的本征矢，故一维谐振子的能级是不简并的.

如果存在变换 g_a，使得(24)式不成立，这是一般情形，$U(a)|\Phi_\lambda\rangle$与$|\Phi_\lambda\rangle$满足(13)式，因此，$U(a)|\Phi_\lambda\rangle$与$|\Phi_\lambda\rangle$是不同的，这便是能级简并的情形.

为了简化记号，我们将(13)式写成

$$U(a)|\Phi_i\rangle=\sum_{k=1}^{f}D_{ki}(a)|\Phi_k\rangle \tag{25}$$

本征矢的集合$\{|\Phi_i\rangle\}$(其中 $i=1,2,\cdots,f$)中全部成员都属于 H 的相同本征值 λ，它们张开一个表示. 为了区分属于 H 的不同本征值的本征矢张开的不同表示，我们在上式中各有关的量加上上标，例如对于特定的表示，我们写成

$$U(a)|\Phi_i^{(\alpha)}\rangle=\sum_{k=1}^{f^{(\alpha)}}D_{ki}^{(\alpha)}|\Phi_k^{(\alpha)}\rangle \tag{26}$$

其中集合$\{|\Phi_i^{(\alpha)}\rangle\}$($i=1,2,\cdots,f^{(\alpha)}$)张开表示 $\mathscr{D}^{(\alpha)}$的空间，表示$\mathscr{D}^{(\alpha)}$由矩阵集合组成：

$$\mathscr{D}^{(\alpha)}\equiv\{D^{(\alpha)}(0),\cdots,D^{(\alpha)}(a),\cdots,D^{(\alpha)}(\beta),\cdots\} \tag{27}$$

每一个矩阵 $D^{(\alpha)}(a)$是 $f^{(\alpha)}$维的，它的矩阵元是 $D_{ki}^{(\alpha)}(a)$. 表示 $\mathscr{D}^{(\alpha)}$属于 H 的某一确定的本征值 $\lambda^{(\alpha)}$.

基本方程(26)式常常解释为$|\Phi_i^{(\alpha)}\rangle$按不可约表示 $\mathscr{D}^{(\alpha)}$的第 k 行变换.

3. 真实简并和偶然简并

(13)式关于群 G 的表示可能是不可约的(irreducible)，也可能

是可约的(reducible). 如果是可约的，则不变子空间 $m(\lambda_i)$ 可以进一步约化为两个或更多个不变子空间.

$$m(\lambda_i) = m^{(1)} + m^{(2)} + \cdots \tag{28}$$

例如氢原子属于能量 E_n 的 n^2 个本征矢 Φ_{nlm} 就构成旋转群 SO_3 的可约表示，因为我们可以把它们所张的不变空间分解为如下的不变子空间：

$$m(E_n) = m^{(0)} + m^{(1)} + \cdots + m^{(n-1)} \tag{29}$$

式中右边各项上标代表角量子数 l 的数值. $m^{(l)}$ 是由球函数 Y_{lm} 张成的 $2l+1$ 维不变子空间，它构成 SO_3 的不可约表示

$$U(SO_3)Y_{lm} = \sum_{m'=-l}^{l} D^{(l)}_{m'm} Y_{lm'} \tag{30}$$

构成这个不可约表示的本征矢自然仍属于能级 E_n. 可见，构成同一不可约表示的本征矢总是属于同一能级的.

属于不同的不可约表示的本征矢，它们的能量是否相等呢？设 $|\Phi_n\rangle$ 和 $|\Phi_m\rangle$ 属于对称变换 G 的不同的不可约表示. 如果 G 包括了 H 的所有对称变换，就不存在其他对称变换(也就是除了 $U(a)$ 外，不再有其他算符与 H 对易)可以把 $|\Phi_n\rangle$ 和 $|\Phi_m\rangle$ 互相变换，使它们同时满足同一个(12)式和(13)式，因此，属于不同的不可约表示的本征矢，它们的能量是不相等的. 例如一般辏力场(库仑场除外)中，不同 l 的本征矢属于旋转群 SO_3 的不同的不可约表示，因此，不同 l 的本征矢其能量不同. 这时，能级简并度为 $2l+1$. 这种由已知的对称性引起的能级简并叫做"正常简并"(normal degeneracy)或真实简并(genuine degeneracy or essential degeneracy).

如果对称变换 G 没有包括体系(H)的全部对称性(即除 $U(a)$ 外，还有其他算符与 H 对易)，则新的(即未被考虑的)对称性变换就可能把属于 $U(a)$ 的两个不同的不可约表示的本征矢 $|\Phi_n\rangle$ 和 $|\Phi_m\rangle$ 相互变换，使 $|\Phi_n\rangle$ 和 $|\Phi_m\rangle$ 可能同时满足同一关系(12)式，从而不同的不可约表示的本征矢就可能属于同一能级，这样能级简并度就增加了. 这种不是由于已知的对称性引起的简并，称为"偶然简并"(accidental degeneracy). 这时原来的对称变换群 G 的不

同的不可约表示的直和组成一可约表示.这就是可约表示的本征矢有可能属于同一能级的情形.偶然简并的出现,是由于体系存在一个比所考虑的对称性群更大的对称性群(larger symmetry group).

例如,氢原子的哈密顿量在三维转动群(three-dimensional rotation group)SO_3下是不变的,应该预期每一简并能级属于旋转群的不同表示,因而具有相同的角量子数l,即简并度为$2l+1$(即“m”简并).然而,情况并非这样,一组具有不同l的简并态也具有相同的能量,这就出现了能级对“l”的简并,即偶然简并.这种偶然简并出现的理由是体系存在比SO_3更大的对称性群SO_4群,即四维旋转群(four-dimensional rotation group),在SO_4下H是不变的.因此,能级的简并应由这个更大的SO_4群来说明.一般而言,如果这个更大的群已经包括了体系的全部对称性,则无所谓“偶然”简并,全部都是真实简并了.三维各向同性谐振子对SO_3对称性而言也是偶然简并,更大的对称性群是SU_3群.

总之,由于体系存在某种对称性,在对称性群G下,体系的H是不变的,即$[H,U(a)]=0$,同时变换态$U(a)|\Phi_\lambda\rangle$与$|\Phi_\lambda\rangle$之间由(13)式联系,其中$\{D(a)\}$构成对称性群G的一个f维表示.这个表示一般说来是不可约的,但也可能出现可约的情况.如该对称性群概括了体系(H)的全部对称性,则表示是不可约的,这时能级出现真实简并,简并度为f(当对称性群是阿贝尔群时,$f=1$,即能级不简并).反之,如果所考虑的对称性群没有概括体系的全部对称性,则将出现可约的情况,这时能级将附加出现“偶然简并”.所谓“偶然简并”,是指所选用的对称性群并未完全地反映体系的对称性,而我们之所以讨论这种对称性群可能有两个原因,一是体系的全部对称性不是那样明显,在历史上一段时间内尚未被人们认识到;另一种可能是我们所选用的对称性群虽未概括体系的全部对称性,但它所对应的守恒量是物理上常用的重要的力学量,所以人们还是习惯采用它来分析问题.

§13 氢原子的动力学对称性

1. 开普勒问题

上节曾经指出，对称性群 SO_3 没有概括氢原子的全部对称性，因而能级简并度不是一般中心势所应有的简并度 $2l+1$，而是 $n^2 \geqslant 2l+1$，其中出现了所谓偶然简并. 本节专题讨论氢原子能级简并与动力学对称性(dynamical symmetry)的关系.

人们熟知，中心力场(辏力场)的势为

$$V(\boldsymbol{r}) = V(r) \tag{1}$$

具有球对称性(spherical symmetry). 库仑(Coulomb)场是特殊的中心力场，因为势与离开中心距离 r 的依赖关系是特殊而简单的反比例关系：

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \tag{2}$$

由于库仑相互作用的这种特殊形式，使得粒子在库仑场中运动时出现一般中心力场所没有的新性质. 例如在经典力学中，辏力场只能保证质点的轨道是平面曲线(平面通过力心，法线方向与角动量 $\boldsymbol{L}$ 的方向相同)，并不能保证轨道为一闭合曲线. 但在开普勒(Kepler)问题中，行星绕太阳运行的轨道是一闭合曲线(椭圆，ellipse). 因此，除能量和角动量是守恒量之外，还出现新的守恒量，即所谓龙奇—楞兹矢量(Runge-Lenz vector)

$$\boldsymbol{R} = \frac{1}{\mu}\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{L} - k\frac{\boldsymbol{r}}{r} \tag{3}$$

其中 $k = GM_{日} M_{地}$，$\boldsymbol{R}$ 满足

$$\frac{d\boldsymbol{R}}{dt} = 0 \tag{4}$$

$$\boldsymbol{R} \cdot \boldsymbol{L} = 0 \tag{5}$$

因此可用 $\boldsymbol{R}$ 来确定椭圆长轴的指向，使长轴不发生进动(precession)，从而保证轨道的闭合性.

与经典的开普勒问题相似，在氢原子问题中，我们将会看到，

Runge-Lenz 矢量的三个分量也是新的守恒量，而且能级出现了比一般中心力场更大的简并度. 我们把辏力场的球对称性称为几何对称性（geometrical symmetry）或时空对称性（space-time symmetry），而与库仑相互作用相联系的对称性称为动力学对称性.

2. SO_3 群与 SO_4 群

由于辏力场具有旋转对称性，体系的角动量守恒，即

$$\left.\begin{aligned}&[L_i,H]=0,\quad i=x,y,z\\&[L^2,H]=0\end{aligned}\right\}\tag{6}$$

L_x,L_y,L_z 之间满足如下对易关系：

$$[L_j,L_k]=i\hbar\varepsilon_{jkl}L_l,\quad j,k,l=x,y,z\tag{7}$$

它们构成一个封闭的代数（closed algebra），所以产生一个李群，这个李群就是三维空间的转动群 SO_3 群. 因为 SO_3 群的无穷小算符或生成元的"李乘积"与(7)式完全一样，所以，角动量算符的三个分量 L_x,L_y,L_z 可取为 SO_3 群的无穷小算符. 因此，具有球对称性的体系，其对称性群是 SO_3 群；反之，SO_3 群可描述束缚在中心力场中运动的粒子的对称性.

SO_3 群的不可约表示的维数为 $2l+1$，故能级简并度为 $2l+1$（相应于 L^2 一定，L_z 取各种可能值的数目）. 不同 l 的本征矢属于 SO_3 群不同的不可约表示，因而不同 l 的本征矢的能量不同.

对于库仑场，例如氢原子，其能级简并度 $n^2\geqslant 2l+1$，这意味着库仑场比一般中心力场的对称性更高. 因此，SO_3 群未能概括氢原子的全部对称性，实际上，它只反映了氢原子的几何对称性. 可以期望，描述氢原子体系的对称性群应该是包括 SO_3 群作为其子群并能完全地反映体系全部对称性的更大的群. 显然，这样的群应该能反映库仑相互作用的特殊对称性. 现在我们就来寻找这样的群.

在由经典力学向量子力学过渡时，为了保证厄密性，我们重新定义 Lenz 矢量为

$$\boldsymbol{R}=\frac{1}{2\mu}(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})-\frac{e^2}{r}\boldsymbol{r}\tag{8}$$

利用 r 与 p 之间的对易关系，经过计算可得

$$[R_i, H] = 0, \quad i = x, y, z \tag{9}$$

$$L \cdot R = R \cdot L = 0 \tag{10}$$

$$R^2 = \frac{2H}{\mu}(L^2 + \hbar^2) + e^4 \tag{11}$$

(9)式表明，在氢原子问题中，除了角动量 L 的三个分量是守恒量外，Lenz 矢量 R 的三个分量也是守恒量.

泡利把 R 的三个分量也看作是某一无穷小变换的生成元，正如把 L 的三个分量看作是无穷小转动的生成元一样. 这样，我们就要寻找六个生成元 L_i 和 $R_i(i=x,y,z)$的代数关系，即 15 个对易关系式. L 的三个分量的对应关系是已知的，即(7)式. 利用角动量算符与 p, r 的对易式及$[L, \frac{1}{r}]=0$，经过计算可得

$$[R_j, L_k] = i\hbar\varepsilon_{jkl}R_l, \quad j,k,l = x,y,z \tag{12}$$

$$[R_j, R_k] = -i\hbar\frac{2H}{\mu}L_l, \quad j,k,l = x,y,z \tag{13}$$

可见，L 和 R 的六个分量不构成封闭的代数，因为虽然(7)式和(12)式仅包含 L 和 R 本身，但(13)式则出现了 L, R 六个分量以外的算符 H. 幸运的是，H 是运动常数，与 L, R 均对易. 如果我们限于希尔伯特空间中具有确定能量 E 的不变子空间来讨论问题，则 H 可用 E 代替. 对于束缚态，$E<0$，可把(13)式中因子$(-H)$引入新算符 R' 中：

$$R' = (-\frac{\mu}{2E})^{1/2}R \tag{14}$$

于是，容易得到

$$[L_j, L_k] = i\hbar\varepsilon_{jkl}L_l, \tag{7}$$

$$[R'_j, L_k] = i\hbar\varepsilon_{jkl}R'_l, \quad j,k,l = x,y,z \tag{15}$$

$$[R'_j, R'_k] = i\hbar\varepsilon_{jkl}L_l \tag{16}$$

由以上诸式可以看出，L, R'的六个分量构成封闭的李代数，因此，$L_x, L_y, L_z, R'_x, R'_y, R'_z$ 是李群的无穷小算符.

由群论知道，SO_4 群的无穷小算符的李代数与(7)、(15)、(16)

诸式完全一样，所以，$L_x, L_y, L_z, R'_x, R'_y, R'_z$ 便可看作是 SO_4 群的无穷小算符，氢原子的对称性群是 SO_4 群.

又由(7)式可知，$\boldsymbol{L}$ 的三个分量构成封闭的李代数，它们是 SO_3 群的无穷小算符，所以 SO_4 群包含 SO_3 群作为其子群. 换句话说，库仑相互作用的动力学对称性包括了几何对称性在内，$V(r) \sim \frac{1}{r}$ 的特殊形式使库仑场比一般中心力场具有更高的对称性，这就是氢原子能级简并度大于中心力场中粒子能级简并度的原因.

从上面的讨论可得出结论，SO_4 群可描述氢原子的动力学对称性，这时全部简并都是真实简并. 所谓"偶然简并"的出现，是由于我们所选用的对称性群并未完全反映体系的对称性，例如我们用转动群 SO_3 的不可约表示来讨论氢原子时就会出现这种偶然简并的情况. SO_3 群虽未概括氢原子的全部对称性，但它所对应的守恒量角动量是物理上常用的重要的力学量，所以人们还是习惯采用它来分析问题.

3. 氢原子能量公式

利用 SO_4 群的李代数(7)、(15)、(16)诸式及 Runge-Lenz 矢量的定义和性质(8)、(9)、(10)、(11)诸式，可以用纯代数的方法计算氢原子的能量公式. 1926 年泡利首创这种方法，与薛定谔同时地，各自独立地得出了氢原子能量公式，而薛定谔是从波动方程出发处理问题的，是今天人所共知的解微分方程的方法.

我们定义两个量

$$\boldsymbol{I} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{L} + \boldsymbol{R}') \tag{17}$$

$$\boldsymbol{M} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{L} - \boldsymbol{R}') \tag{18}$$

由于 $\boldsymbol{L}$ 与 $\boldsymbol{R}'$ 分别与 H 对易，容易得到

$$[\boldsymbol{I}, H] = 0 \tag{19}$$

$$[\boldsymbol{M}, H] = 0 \tag{20}$$

故 $\boldsymbol{I}$ 和 $\boldsymbol{M}$ 也是守恒量. 利用(7)、(15)、(16)诸式可以证明

$$[I_j, I_k] = i\varepsilon_{jkl} I_l \tag{21}$$

$$[M_j, M_k] = i\varepsilon_{jkl} M_l \tag{22}$$

$$[I_j, M_k] = 0 \tag{23}$$

(21)式、(22)式与角动量算符的对易关系(7)式完全相同，可见，I、M 的分量各自构成 SO_3 群的李代数. 因此，它们的本征值就象角动量的本征值的表式一样：

$$\left.\begin{aligned} I^2 &= i(i+1)\hbar^2 \\ M^2 &= m(m+1)\hbar^2, \end{aligned}\right\} \quad i, m = 0, \frac{1}{2}, 1, \cdots \tag{24}$$

因为 SO_4 群的秩为 2，故有两个卡塞米尔算符(它必须与 SO_4 群的所有无穷小算符对易)，可选为

$$\boldsymbol{I}^2 = \frac{1}{4}(\boldsymbol{L} + \boldsymbol{R}')^2 \tag{25}$$

$$\boldsymbol{M}^2 = \frac{1}{4}(\boldsymbol{L} - \boldsymbol{R}')^2 \tag{26}$$

或选为

$$C = I^2 + M^2 = \frac{1}{2}(L^2 + R'^2) \tag{27}$$

$$\begin{aligned} C' &= I^2 - M^2 \\ &= \frac{1}{2}(\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{R}' + \boldsymbol{R}'\cdot\boldsymbol{L}) \\ &= 0 \end{aligned} \tag{28}$$

上式最后一步只要注意(14)式，便容易从 $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{R} = \boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{L} = 0$ 得到 $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{R}' = \boldsymbol{R}'\cdot\boldsymbol{L} = 0$. 由(28)式可得

$$I^2 = M^2 \tag{29}$$

这时(27)式可写成

$$C = 2I^2 = 2M^2 = \frac{1}{2}(L^2 + R'^2) \tag{30}$$

其本征值为

$$C = 2i(i+1)\hbar^2, \quad i = 0, \frac{1}{2}, 1, \cdots \tag{31}$$

将(14)式代入(30)式，并注意到(11)式，得

$$C = \frac{1}{2}\left(L^2 - \frac{\mu}{2E}R^2\right) = -\frac{\mu e^4}{4E} - \frac{1}{2}\hbar^2 \tag{32}$$

比较(31)式与(32)式得

$$E = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2(2i+1)^2} \tag{33}$$

设 $$n = 2i + 1, \quad n = 1,2,3,\cdots \tag{34}$$

则(33)式变成

$$E = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2 n^2}, \qquad n = 1,2,3,\cdots \tag{35}$$

这就是氢原子能级公式(Bohr 公式).

将(17)式与(18)式相加,可得

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{I} + \boldsymbol{M} \tag{36}$$

上式可看作是两个角动量相加,$\boldsymbol{L}$ 的本征值是熟知的:

$$\boldsymbol{L}^2 = l(l+1)\hbar^2 \tag{37}$$

$\boldsymbol{I}$ 和 $\boldsymbol{M}$ 的本征值已在(24)式中给出,按照角动量耦合规则:

$$l = i + m, i + m - 1, \cdots, |i - m|$$

注意到 $i=m=0,\frac{1}{2},1,\cdots$,于是

$$l = 2i, 2i - 1, \cdots, 0$$

再注意(34)式,便得到

$$l = 0,1,2,\cdots,n-1 \tag{38}$$

这就是给定 n 后,l 可能取的值. 由此可求得氢原子的能级简并度为

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2 \tag{39}$$

以上结果与解氢原子的定态薛定谔方程得到的结果完全一致.

§14 微扰与简并的消除

微扰论是应用量子力学处理实际问题时最常用的近似方法. 本节讨论简并态受到微扰(perturbation)的影响. 一般说来,微扰可能使体系的对称性受到破坏,从而导致微扰解除简并(部分地或全部).

设体系的哈密顿量 H 可分为两部分:

$$H = H^0 + H' \tag{1}$$

其中 H^0 是未受微扰的(零级的)哈密顿量，能准确求解，H' 代表微扰. 为了方便，将(1)式写成

$$H = H^0 + \varepsilon H' \tag{2}$$

式中 ε 是微扰强度参数，$\varepsilon=0$ 表示微扰不存在(零阶微扰)，ε 在 0 ～1 间连续变化.

我们假定，在对称性群 G 下 H^0 是不变的. 无微扰时定态薛定谔方程有解：

$$H^0|\Phi_i^{(\alpha)}\rangle = E^0|\Phi_i^{(\alpha)}\rangle \quad i = 1,2,\cdots,n \tag{3}$$

一般地，能级 E^0 是简并的，用 $|\Phi_i^{(\alpha)}\rangle$ 表示简并态，简并度设为 n. 由于 H^0 在 G 下是不变的，集合 $\{|\Phi_i^{(\alpha)}\rangle\}$ 构成对称性群 G 表示的基，即张开对称性群 G 的 n 维表示，它是可约的，也可以是不可约的，表示空间记为 m_0.

现在我们引入微扰(ε 从零开始增大)，微扰的影响一般地使简并能级发生移位(shift)和分裂(split). 这时能级 E^0 将变成 A 个不同的能级 $E_r(r=1,2,\cdots,A)$，当然，每一个 E_r 可能仍然是简并的. 用 d_r 记能级 E_r 的简并度，因此有 d_r 个不同的态矢 $|\Phi_k^{(r)}\rangle(k=1,2,\cdots,d_r)$属于能级 E_r. 然而，与任何具体的对称性质无关，微扰的影响不会改变态矢量的数目，因而有

$$\sum_{r=1}^{A} d_r = n \tag{4}$$

为了研究微扰的影响，我们区分三种情形：

(1) 微扰 H' 和 H^0 具有相同的对称性(H 和 H^0 在对称性群 G 下都是不变的)，而$\{|\Phi_i^{(\alpha)}\rangle\}$所张的 G 的表示是不可约的，即未受微扰的本征值 E^0 的简并是本质的.

(2) 微扰 H' 和 H^0 具有相同的对称性，而$\{|\Phi_i^{(\alpha)}\rangle\}$所张的 G 的表示是可约的，即 E^0 的简并部分是偶然的；

(3) 微扰 H' 的对称性低于 H^0 的对称性，即 H 仅在 G 的子群 G' 下是不变的.

下面分别三种情形进行讨论：

(1) H'和 H^0 具有相同的对称性，而$\{|\Phi_i^{(\alpha)}\rangle\}$构成对称性群 G 的不可约表示.

定理 1 如果具有与 H^0 相同对称性的微扰作用于体系，则仅有本质简并的能级 E^0 只可能发生移位而不发生分裂.

我们利用归谬法(reductio ad absurdum)来证明. 让我们假定能级 E^0 发生分裂，为简单计，设分裂为两个能级 E_1 和 E_2，则由(4)式有 $d_1+d_2=n$. 表示空间 m_0 则变为由微扰后的本征矢所展的新空间 $m(\varepsilon)$，空间维数仍为 n. 对应于此二能级，$m(\varepsilon)$分为两个不变的子空间：$m(\varepsilon)=m_1+m_2$. 于是，G 在 $m(\varepsilon)$中的表示应是可约的，设其矩阵取如下形式：

$$D(\alpha,\varepsilon)=\begin{pmatrix} T(\alpha,\varepsilon) & 0 \\ 0 & Q(\alpha,\varepsilon) \end{pmatrix} \begin{matrix} d_1 \\ d_2 \end{matrix} \tag{5}$$

其中 T 和 Q 是较低维的表示，它们的矩阵元自然是参数 ε 的连续函数. 但是，当 $\varepsilon\to 0$ 时，矩阵 D 应保持原有形式不变，即在撤除微扰的极限情形下，矩阵 $D(\alpha)$仍是块对角的形式：

$$D(\alpha,0)=\begin{pmatrix} T(\alpha,0) & 0 \\ 0 & Q(\alpha,0) \end{pmatrix} \tag{6}$$

这意味着属于 E^0 的未受微扰的态矢集$\{|\Phi_i^{(\alpha)}\rangle\}$所张的表示是可约的，这与开始时的假设矛盾. 因此，微扰不能使本质简并的能级发生分裂.

以上证明对任何阶的微扰都适用.

在微扰作用下，能级 E^0 将发生移位. 在一级近似情况下，E^0 由 $E^{(1)}$代替，由下式给出：

$$\begin{aligned} E^{(1)} &= \langle \Phi_i^{(\alpha)} | H | \Phi_i^{(\alpha)} \rangle \\ &= E^0 + \varepsilon \langle \Phi_i^{(\alpha)} | H' | \Phi_i^{(\alpha)} \rangle, \qquad i=1,2,\cdots,n \end{aligned} \tag{7}$$

式中$|\Phi_i^{(\alpha)}\rangle$是未受微扰的属于 E^0 的任一态矢，即对于 m_0 中所有态矢，(7)式中第二项都相等①. 所以，微扰确能使能级 E^0 发生移位 $\varepsilon\langle \Phi_i^{(\alpha)} | H' | \Phi_i^{(\alpha)} \rangle$.

① 严格证明可参考 Roman 著，Advanced Quantum Theory, § 6—3, P. 592.

由上面讨论可得出结论：未受微扰的本征值 E^0 是本质简并(不存在偶然简并)，即属于 E^0 的简并态矢的集合 $\{|\Phi_i^{(\alpha)}\rangle\}$ 构成对称性群 G 的不可约表示时，与 H^0 具有相同对称性的微扰 H' 只能使能级发生移位，而不能引起能级分裂. 在此情形下，微扰不消除本质简并.

[例 1] 原子核的库仑能

考虑一个具有 Z 个质子和 N 个中子的原子核，质量数 $A=N+Z$. 核子间存在强作用力，还有质子间的库仑斥力(Coulomb repulsion). 在短距离时，电磁作用力比强作用力弱得多，因而把质子间的库仑斥力看作微扰. 于是我们有

$$H = H^0 + H'$$

式中 H^0 包含所有核子的动能加上它们之间由于强作用而产生的势能，而 H' 是库仑能

$$H' = \frac{e^2}{2}\sum_{i\neq k=1}^{z}\frac{1}{r_{ik}} \tag{8}$$

其中 $r_{ik}=|r_i-r_k|$ 是第 i 个和第个 k 质子间的距离.

由于未受微扰的哈密顿量 H^0 是转动不变的，对称性群是三维转动群 SO_3，故无微扰时能量 E^0 与 l 有关. 实际上核力还与核子的自旋有关，严格说来 E^0 与总角动量量子数 j 有关，因而 H^0 的定态由 j 标志，即 $|\Phi^{(j)}\rangle$. 由于不存在更高的对称性，属于给定能级 E^0 的态矢对于总角动量的分量 j_3 是简并的，用 $|\Phi_{j_3}^{(j)}\rangle$ 记之. 集合 $\{|\Phi_{j_3}^{(j)}\rangle\}$ 张成转动群的不可约表示，没有偶然简并.

(8)式给出的微扰也具有转动不变性，因而 H' 与 H^0 有相同的对称性，由定理可知，库仑修正(Coulomb correction)将不分裂简并能级 E^0，仅引起能级移位. 在一级近似中

$$E^{(1)} = E^0 + \frac{e^2}{2}\langle\Phi_{j_3}^{(j)}|\sum_{i\neq k=1}^{z}\frac{1}{r_{ik}}|\Phi_{j_3}^{(j)}\rangle \tag{9}$$

由于泡利不相容原理，$|\Phi_{j_3}^{(j)}\rangle$ 对质子的交换是反对称的，使得(8)式中每一项对(9)式的贡献都相同，因而得

$$E^{(1)} = E^0 + \frac{e^2}{2}Z(Z-1)\langle\Phi_{j_3}^{(j)}|\frac{1}{r_{12}}|\Phi_{j_3}^{(j)}\rangle \tag{10}$$

式中第二项就是一级近似下能级 E^0 的移位.

(2) H'和 H^0 具有相同的对称性,而$\{|\Phi_i^{(\alpha)}\rangle\}$张成对称性群 G 的可约表示.

若 G 的可约表示记为 $\mathscr{D}^{(\alpha)}$,假定

$$\mathscr{D}^{(\alpha)} = \mathscr{D}^{(1)} \oplus \mathscr{D}^{(2)} \oplus \cdots \oplus \mathscr{D}^{(\nu)} \oplus \cdots \oplus \mathscr{D}^{(A)} \tag{11}$$

其中 $\mathscr{D}^{(\nu)}$的维数为 d_ν. 这时属于 E^0 的不变空间 m_0 可分解为如下不变子空间之和:

$$m_0 = m^{(1)} + m^{(2)} + \cdots + m^{(\nu)} + \cdots + m^{(A)} \tag{12}$$

只要将定理 1 应用于每一个不变子空间(它张开一个不可约表示 $\mathscr{D}^{(\nu)}$),就可得到如下定理:

定理 2 如果具有与 H^0 相同对称性的微扰作用于体系,那末属于可约表示的能级 E^0(此可约表示包含 A 个不可约表示,维数分别为 $d_1, d_2, \cdots, d_\nu, \cdots, d_A$)至多能分裂成 A 个能级 $E_1, E_2, \cdots, E_\nu, \cdots, E_A$,其中 E_ν 的简并度为 d_ν.

由此可知,微扰能部分地或全部消除(remove)偶然简并.

[例 2] 碱金属原子中价电子的能级

碱金属原子中价电子的哈密顿量近似地表示为:

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{r} + \frac{c}{r^a} = H^0 + H'$$

其中
$$H^0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{r}$$

是价电子的动能和核的势能,而

$$H' = \frac{c}{r^a}$$

可看作是内层电子对价电子的作用,即把内层电子的影响看作微扰. 无微扰时价电子的能级与氢原子相似:

$$H^0|\Phi_i^{(\alpha)}\rangle = E_n^0|\Phi_i^{(\alpha)}\rangle, \quad i = 1,2,\cdots,n^2$$

式中 n 是主量子数,能级 E_n^0 的简并度为 n^2. 如果我们用转动群 SO_3 来描述体系,因为 SO_3 群的不可约表示是 $2l+1$ 维的,所以 E_n^0 对应的 SO_3 表示 $\mathscr{D}^{(\alpha)}$是可约的,即 E_n^0 存在偶然简并. $\mathscr{D}^{(\alpha)}$可分解为如下不可约表示的直和:

$$\mathscr{D}^{(n)} = \mathscr{D}^{(0)} \oplus \mathscr{D}^{(1)} \oplus \cdots \oplus \mathscr{D}^{(n-1)}$$

式中右边各项右上角括号中数字是角量子数 l.

因为 H' 与 H^0 具有相同的旋转对称性，故微扰作用使能级 E_n^0 分裂为 n 个能级 $E_{nl}, l=0,1,2,\cdots,(n-1)$，这就是碱金属原子的能级，每一能级的简并度为 $2l+1$. 这样，微扰消除了偶然简并.

(3) 微扰 H' 的对称性低于 H^0 的对称性

定理 3 假定 H^0 在对称性群 G 下是不变的，而 H 仅在 G 的子群 G' 下不变. 设无微扰能级 E_n^0 确定 G 的一个 $f^{(a)}$ 维表示 $\mathscr{D}^{(a)}$（可约的或不可约的）. 若 $\mathscr{D}^{(a)}$ 对 G' 是可约的：

$$\mathscr{D}^{(a)} = \mathscr{D}'^{(b_1)} \oplus \mathscr{D}'^{(b_2)} \oplus \cdots \oplus \mathscr{D}'^{(b_r)} \oplus \cdots \oplus \mathscr{D}'^{(b_A)}$$

其中 $\mathscr{D}'^{(b_r)}$ 是 G' 的不可约表示，维数为 $f^{(b_r)}$：

$$\sum_{r=1}^{A} f^{(b_r)} = f^{(a)}$$

则微扰 H' 能使能级 E_n^0 最多分裂为 A 个能级 $E_1, E_2, \cdots, E_r, \cdots, E_A$，能级 E_r 的简并度 $f^{(b_r)}$.

其实对于对称性较低的 G' 来说，相当于定理 2 的情形.

[例 3] 外磁场中的碱金属原子

在沿 z 方向的均匀外磁场 $\mathscr{H}$ 中，碱金属原子的哈密顿量为

$$H = H^0 + H'$$

其中

$$H' = \frac{e}{2\mu c} L_z \mathscr{H}$$

H^0 为例 2 中的 H，在 SO_3 群下不变，而 H' 在 SO_2 群下不变（具有轴对称性）. SO_2 群是 SO_3 群的子群，故碱金属原子在外磁场中的对称性低于无外场时的对称性. 由于 SO_2 群是阿贝尔群，其不可约表示是一维的，故在外磁场中，碱金属原子能级 E_{nl} 可分裂为 $2l+1$ 个能级，微扰完全消除了简并.

归纳 § 12 和本节所述，得出如下几个结论：

(1) 能级简并是由体系的对称性引起的，简并度的大小与对称性的高低有关，对称性越高，简并度越大.

(2) 偶然简并的存在是由于存在着未被发现或者未被考虑的

对称性，即体系实际具有的对称性高于我们所讨论的对称性.

(3) 微扰的作用往往破坏或降低体系的对称性，从而微扰往往引起能级分裂，导致简并的部分或全部消除. 单纯从对称性考虑，只能告诉我们能级最多可能分裂成几个能级，而能级移位的大小与微扰强度有关，需要进行具体的计算.

第七章　量子力学中的角动量

角动量与物理体系的转动性质有关.我们将会看到,普通三维空间中的几何转动 R,对应于态空间中的转动算符 $U(R)$:

$$R \Rightarrow U(R)$$

它作用在态空间中的态矢量 $|\psi\rangle$ 上得到体系转动后的态矢量 $|\psi'\rangle$:

$$|\psi'\rangle = U(R)|\psi\rangle$$

我们将在§1中找到转动算符(rotation operator)与几何转动(geometrical rotation)之间的关系,亦即轨道角动量与转动的关系.在§2中讨论角动量的一般理论.在§3中我们将证明转动算符的集合就是转动群的表示.在§4中讨论两个角动量的耦合问题.

§1　转动与角动量

1. 普通三维空间的几何转动

我们考察保持给定点不动的旋转(此旋转中心将选为坐标系的原点).这种旋转是空间各点的一种整体位移,其中0点保持不动.在这样的位移中,每一点 P 取一新的位置 P',而且 P 和 P' 之间有一一对应关系.因此绕空间0点的旋转可定义为空间各点之间的一种一一对应变换,在其中,点0变换为它本身,而距离(以及角度)和坐标轴指向皆保持不变.第六章§5中曾经指出,空间旋转可由三个实参数 $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ 确定,这三个参数分别表示绕三个坐标轴转过的角度.旋转也可由旋转轴(给定单位矢量 $\boldsymbol{u}$ 或它的极角 θ 和 φ)和旋转角 $\alpha(0 \leqslant \alpha \leqslant 2\pi)$ 来确定.例如,可以选取矢量

$$\boldsymbol{\alpha} = \alpha \boldsymbol{u} \tag{1}$$

此矢量的模等于旋转角，它的方向决定旋转轴. 旋转轴为单位矢量 $\boldsymbol{u}$、旋转角为 α 的几何转动记为 $R_{\boldsymbol{u}}(\alpha)$. 旋转也可由欧拉角$(\alpha,\beta,\gamma)$确定，参阅本章 § 3.

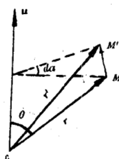


图 7-1

绕任意轴 $\boldsymbol{u}$ 转过无穷小角度 $d\alpha$ 的转动称为无穷小转动，记为 $R_{\boldsymbol{u}}(d\alpha)$. 在无穷小转动下，矢量 $\boldsymbol{OM}$ 的变换可表为(参阅图 7-1)

$$\boldsymbol{OM}' = R_{\boldsymbol{u}}(\mathrm{d}\alpha)\boldsymbol{OM} = \boldsymbol{OM} + \mathrm{d}\alpha\boldsymbol{u} \times \boldsymbol{OM} \tag{2}$$

或写成

$$\boldsymbol{r}' = R_{\boldsymbol{u}}(\mathrm{d}\alpha)\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r} + \mathrm{d}\alpha\boldsymbol{u} \times \boldsymbol{r} \tag{3}$$

空间转动是不可对易的，即

$$R_{\boldsymbol{u}}(\mathrm{d}\alpha)R_{\boldsymbol{u}'}(\mathrm{d}\alpha') \neq R_{\boldsymbol{u}'}(\mathrm{d}\alpha')R_{\boldsymbol{u}}(\mathrm{d}\alpha) \tag{4}$$

可以证明①：

$$R_j(-\mathrm{d}\alpha')R_i(\mathrm{d}\alpha)R_j(\mathrm{d}\alpha')R_i(-\mathrm{d}\alpha) = R_k(\mathrm{d}\alpha\mathrm{d}\alpha') \tag{5}$$

式中下标 $\boldsymbol{i}$、$\boldsymbol{j}$、$\boldsymbol{k}$ 表示沿三个坐标轴的单位矢量. 上式描述空间转动的非对易结构.

但是，绕同一轴的两个转动是可对易的：

$$R_{\boldsymbol{u}}(\mathrm{d}\alpha)R_{\boldsymbol{u}}(\mathrm{d}\alpha') = R_{\boldsymbol{u}}(\mathrm{d}\alpha')R_{\boldsymbol{u}}(\mathrm{d}\alpha) = R_{\boldsymbol{u}}(\mathrm{d}\alpha + \mathrm{d}\alpha') \tag{6}$$

因为旋转是连续的，有限转动可以通过无穷小转动而实现，或者说，每一个有限转动可以分解为无数个无穷小转动. 因此，对有限转动 $R_{\boldsymbol{u}}(\alpha)$，类似于(4)式和(6)式的性质同样存在.

2. 态空间中的转动算符

现在我们来寻找转动算符 $U(R)$与几何转动 R 之间的联系.

(1) 转动后的态

在给定时刻，粒子的量子力学态在态空间中由刃矢(ket) $|\psi\rangle$ 描述，与之相联系的波函数为 $\psi(\boldsymbol{r}) = \langle \boldsymbol{r}|\psi\rangle$. 现在对体系施以旋转 R，它使普通三维空间中的点 $\boldsymbol{r}_0(x_0,y_0,z_0)$变为 $\boldsymbol{r}'_0(x'_0,y'_0,z'_0)$：

$$\boldsymbol{r}'_0 = R\boldsymbol{r}_0 \tag{7}$$

---

① 参阅 Cohen-Tannoudji, Diu, Laloë, Quantum Mechanics, Vol. 1, P. 692.

体系旋转后态空间中的态矢量则由$|\psi\rangle$变为$|\psi'\rangle$：

$$|\psi'\rangle = U(R)|\psi\rangle \tag{8}$$

式中$U(R)$是转动R在态空间中的映射，称为转动算符．与$|\psi'\rangle$相应的波函数为$\psi'(\boldsymbol{r})=\langle \boldsymbol{r}|\psi'\rangle$．我们假定，粒子是无自旋的，即$\psi(\boldsymbol{r})$是标量波函数．于是，初始波函数$\psi(\boldsymbol{r})$在点$\boldsymbol{r}_0$处的值应等于转动后的波函数$\psi'(\boldsymbol{r})$在点$\boldsymbol{r}'_0$处的值，即

$$\psi'(\boldsymbol{r}'_0) = \psi(\boldsymbol{r}_0) \tag{9}$$

注意到(7)式，有

$$\boldsymbol{r}_0 = R^{-1}\boldsymbol{r}'_0 \tag{10}$$

于是(9)式可表为

$$\psi'(\boldsymbol{r}'_0) = \psi(R^{-1}\boldsymbol{r}'_0) \tag{11}$$

上式对任意点$\boldsymbol{r}'_0$都成立，故可写成如下形式

$$\psi'(\boldsymbol{r}) = \psi(R^{-1}\boldsymbol{r}) \tag{12}$$

(2)无穷小转动算符

首先让我们考虑绕Oz轴的无穷小转动$R_k(\mathrm{d}\alpha)$．未转动前粒子的态由波函数$\psi(\boldsymbol{r})$描述，转动后粒子的态为$\psi'(\boldsymbol{r})$，根据(12)式有

$$\psi'(\boldsymbol{r}) = \psi[R_k^{-1}(\mathrm{d}\alpha)\boldsymbol{r}] \tag{13}$$

式中 $$R_k^{-1}(\mathrm{d}\alpha)\boldsymbol{r} = R_{-k}(\mathrm{d}\alpha)\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r} - (\mathrm{d}\alpha)\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{r} \tag{14}$$

其中最后一步利用了(3)式．上式的分量为

$$\left.\begin{array}{l} x + y\mathrm{d}\alpha \\ y - x\mathrm{d}\alpha \\ z \end{array}\right\} \tag{15}$$

于是，(13)式可写成

$$\psi'(x,y,z) = \psi(x + y\mathrm{d}\alpha, y - x\mathrm{d}\alpha, z) \tag{16}$$

将上式展开，准确到一级无穷小，得到

$$\begin{aligned} \psi'(x,y,z) &= \psi(x,y,z) - \mathrm{d}\alpha\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x,y,z) \\ &= \left[1 - \mathrm{d}\alpha\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)\right]\psi(x,y,z) \\ &= U[R_k(\mathrm{d}\alpha)]\psi(x,y,z) \end{aligned} \tag{17}$$

式中 $$U[R_k(\mathrm{d}\alpha)] = 1 - \mathrm{d}\alpha\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \tag{18}$$

就是无穷小几何转动 $R_k(\mathrm{d}\alpha)$在态空间中对应的转动算符.

根据第六章 § 2(10)式,从上式可得出无穷小算符

$$\mathscr{G} = -i\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \tag{19}$$

令 $$\mathscr{G} = \frac{L_z}{\hbar} \tag{20}$$

则(18)式成为

$$U[R_k(\mathrm{d}\alpha)] = 1 - \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\alpha L_z \tag{21a}$$

其中 $$L_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \tag{21b}$$

是轨道角动量 z 分量算符. (21)式就是无穷小几何转动 $R_k(\mathrm{d}\alpha)$在态空间中对应的转动算符.

将 $\boldsymbol{i},\boldsymbol{j},\boldsymbol{k}$ 和 x,y,z 分别循环置换,便可得到类似(21)式和(22)式的表达式:

$$\left.\begin{aligned} U[R_i(\mathrm{d}\alpha)] &= 1 - \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\alpha L_x \\ L_x &= -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial x}\right) \end{aligned}\right\} \tag{22}$$

$$\left.\begin{aligned} U[R_j(\mathrm{d}\alpha)] &= 1 - \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\alpha L_y \\ L_y &= -i\hbar\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right) \end{aligned}\right\} \tag{23}$$

以上(21—23)诸式就是与无穷小几何转动相联系的态空间中的转动算符. 可见转动算符可借助于角动量算符来表示,也就是说,角动量算符是与普通三维空间的几何转动相联系的.

上述讨论容易推广到绕任意轴作无穷小几何转动 $R_u(\mathrm{d}\alpha)$的情形,这时对应的转动算符为

$$U[R_u(\mathrm{d}\alpha)] = 1 - \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\alpha\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{L} \tag{24}$$

(3) 角动量分量算符的对易关系

现在我们要问，(5)式在态空间中的“映象”是什么？$R_i(d\alpha)$，$R_j(d\alpha)$，$R_k(d\alpha)$在态空间的“映象”分别是(22)、(23)、(21)式，因此，(5)式的“映象”应是

$$[1+\frac{i}{\hbar}d\alpha' L_y][1-\frac{i}{\hbar}d\alpha L_x][1-\frac{i}{\hbar}d\alpha' L_y][1+\frac{i}{\hbar}d\alpha L_x]$$

$$=1-\frac{i}{\hbar}d\alpha d\alpha' L_z \tag{25}$$

将上式左边展开，并令两边 $d\alpha d\alpha'$ 的系数相等，容易得到

$$[L_x,L_y]=i\hbar L_z \tag{26}$$

同理，对下标 i,j,k 和 x,y,z 分别循环置换便可得到

$$[L_y,L_z]=i\hbar L_x \tag{27}$$

$$[L_z,L_x]=i\hbar L_y \tag{28}$$

这就是熟知的轨道角动量算符的对易关系，它们是几何转动非对易结构的结果.

(4) 有限转动算符

现在我们考虑绕 Oz 轴转过任意角度 α 的几何转动 $R_k(\alpha)$，可以用如下方法求得对有限转角 α 的转动算符 $U[R_k(\alpha)]$. 设 $d\alpha=\frac{\alpha}{N}$，其中 N 为大整数. 应用(17)式 N 次，近似地得

$$\psi'(x,y,z)\approx[1-\frac{\alpha}{N}(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x})]^N\psi(x,y,z) \tag{29}$$

当 N 增大时，近似程度更好. 最后，在极限 $N\to\infty$下，注意到

$$e^{-x}=\lim_{N\to\infty}(1-\frac{x}{N})^N$$

(29)式便变成

$$\begin{aligned}\psi'(x,y,z)&=e^{-\alpha(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x})}\psi(x,y,z)\\&=e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha L_z}\psi(x,y,z)\\&=U[R_k(\alpha)]\psi(x,y,z)\end{aligned} \tag{30}$$

于是，得到有限转动 $R_k(\alpha)$对应的转动算符为

$$U[R_k(\alpha)]=e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha L_z} \tag{31}$$

我们选取转轴为 z 方向并无特殊性. 一般地，转动由转角 α 和单位矢量 $\boldsymbol{u}$ 所指明的转轴所决定，于是，可将上式推广为

$$U[R_u(\alpha)] = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha \boldsymbol{u}\cdot \boldsymbol{L}} \tag{32}$$

以上结果可以推广到多粒子体系中去. 因为每一个粒子有一个 L_z 算符，所以，(31)式中的 L_z 应为一个和式所代替. 于是，(31)式可推广为

$$U[R_k(\alpha)] = e^{-\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{n}\alpha(L_z)_j} = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha(L_z)_1}e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha(L_z)_2}\cdots \tag{33}$$

其中 $(L_z)_j$ 之间是相互对易的.

3. 推广到总角动量的情形

以上讨论的结果适用于无自旋的粒子. 一般地，对任意量子力学体系，例如具有自旋的粒子，这时，算符 x,y,z 不再组成力学量的完备集，粒子的态也不再用波函数 $\psi(x,y,z)$ 描述. 我们必须直接地在体系的态空间中考虑问题，并且要考虑包括轨道角动量和自旋角动量在内的总角动量 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{S}$.

在这种情形下，上面得到的许多结果可以推广①. 例如，(21a)、(24)、(31)、(32)诸式分别推广到总角动量的情形：

$$U[R_k(\mathrm{d}\alpha)] = 1 - \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\alpha J_z \tag{34}$$

$$U[R_u(\mathrm{d}\alpha)] = 1 - \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\alpha \boldsymbol{u}\cdot \boldsymbol{J} \tag{35}$$

$$U[R_k(\alpha)] = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha J_z} \tag{36}$$

$$U[R_u(\alpha)] = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha \boldsymbol{u}\cdot \boldsymbol{L}} \tag{37}$$

4. 可观察量的转动和转动不变性

(1) 转动下可观察量的变换

上面我们已经知道，在转动下表征量子力学体系状态的态矢量如何变换((17)式和(30)式). 但是，在量子力学中，体系的态和可观察量是彼此独立地描述的. 因此，需要研究在转动下可观察量

① 参阅 Cohen-Tannoudji, Diu, Laloë, Quantum Mechanics, Vol. 1, P. 702.

如何变换. 可观察量是用线性厄密算符表示的，其变换规律已由第五章 § 2(9)式和(10)式得到：

$$A' = UAU^{-1} = UAU^{+} \tag{38}$$

在无穷小转动 $R_{\boldsymbol{u}}(d\alpha)$ 的特殊情形下，将(35)式代入上式，得到准确到一级近似的变换：

$$\begin{aligned} A' &= \left(1 - \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\alpha\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{J}\right)A\left(1 + \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\alpha\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{J}\right) \\ &= A - \frac{i}{\hbar}\mathrm{d}\alpha[\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{J}, A] \end{aligned} \tag{39}$$

其中用了 $\boldsymbol{J}$ 的厄密性条件 $\boldsymbol{J}^{+} = \boldsymbol{J}$.

(2)标量可观察量

如果对所有转动算符 $U(R)$ 满足

$$A' = A \tag{40}$$

则称可观察量 A 为标量可观察量(scalar observable)，简称标量.

由(39)式可知，若

$$[A, \boldsymbol{J}] = 0 \tag{41}$$

则 $A = A'$. 因此，在转动下，标量可观察量与角动量三个分量对易，或者说，与角动量三个分量都对易的可观察量是标量可观察量.

(3)转动不变性

现在我们来考察薛定谔方程的转动不变性，并将证明孤立系的哈密顿量是一标量可观察量，同时还证明角动量守恒是转动不变性的结果.

考虑处于状态 $|\psi(t_0)\rangle$ 的孤立系. 在时刻 t_0 施以任意旋转 R，体系的态变成

$$|\psi'(t_0)\rangle = U(R)|\psi(t_0)\rangle \tag{42}$$

如果现在让体系自由地从 $|\psi'(t_0)\rangle$ 开始演化，根据薛定谔方程，在时刻 $t_0 + dt$ 的态将是

$$|\psi'(t_0 + \mathrm{d}t)\rangle = |\psi'(t_0)\rangle + \frac{\mathrm{d}t}{i\hbar}H|\psi'(t_0)\rangle \tag{43}$$

另一方面，如果我们没有转动体系，则体系的态在时刻 $t_0 + \mathrm{d}t$ 应为

$$|\psi(t_0+\mathrm{d}t)\rangle = |\psi(t_0)\rangle + \frac{\mathrm{d}t}{i\hbar}H|\psi(t_0)\rangle \tag{44}$$

转动不变性意味着

$$|\psi'(t_0+\mathrm{d}t)\rangle = U(R)|\psi(t_0+\mathrm{d}t)\rangle \tag{45}$$

式中的$U(R)$与(42)式中的$U(R)$相同.由(43)式和(45)式可得

$$|\psi'(t_0)\rangle + \frac{\mathrm{d}t}{i\hbar}H|\psi'(t_0)\rangle = U(R)|\psi(t_0+\mathrm{d}t)\rangle$$

将(44)式代入上式得

$$|\psi'(t_0)\rangle + \frac{\mathrm{d}t}{i\hbar}H|\psi'(t_0)\rangle = U(R)|\psi(t_0)\rangle + \frac{\mathrm{d}t}{i\hbar}U(R)H|\psi(t_0)\rangle$$

再将(42)式代入上式,最后得到

$$U(R)|\psi(t_0)\rangle + \frac{\mathrm{d}t}{i\hbar}HU(R)|\psi(t_0)\rangle$$

$$= U(R)|\psi(t_0)\rangle + \frac{\mathrm{d}t}{i\hbar}U(R)H|\psi(t_0)\rangle$$

上式中$|\psi(t_0)\rangle$是任意的,由此得到

$$[H,U(R)] = 0 \tag{46}$$

上式与第六章§1(28)式或(41)式一致,在那里我们得出结论:体系的哈密顿量在对称变换U下具有不变性.现在由(46)式我们可得出结论:体系的哈密顿量在转动变换$U(R)$下具有不变性.显然,空间转动变换也是对称性变换.

将(37)式代入(46)式可得

$$[H,\boldsymbol{J}] = 0 \tag{47}$$

对比(41)式可知,体系的哈密顿量H是标量可观察量.

根据第六章§1守恒量的判别法则(42)式,由(47)式可得出结论:在转动下孤立系的角动量是运动恒量,即角动量守恒是转动不变性的结果.

§2 角动量的本征值及矩阵表示

1.角动量算符的一般定义

我们以下列对易关系式作为角动量算符的一般定义：

$$
\left.\begin{aligned}
J_xJ_y - J_yJ_x &= i\hbar J_z \\
J_yJ_z - J_zJ_y &= i\hbar J_x \\
J_zJ_x - J_xJ_z &= i\hbar J_y
\end{aligned}\right\} \tag{1}
$$

或

$$
\boldsymbol{J} \times \boldsymbol{J} = i\hbar \boldsymbol{J} \tag{2}
$$

同时，角动量平方算符定义为

$$
J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 \tag{3}
$$

可以证明，J^2 与 $\boldsymbol{J}$ 的每一个分量都对易，即

$$
\left.\begin{aligned}
J^2J_x - J_xJ^2 &= 0 \\
J^2J_y - J_yJ^2 &= 0 \\
J^2J_z - J_zJ^2 &= 0
\end{aligned}\right\} \tag{4}
$$

因此，J^2 与 $\boldsymbol{J}$ 的每一个分量，例如 J_z，有共同的本征矢量，记为 $|j,m\rangle$，本征方程设为

$$
J^2|j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2|j,m\rangle \tag{5}
$$

$$
J_z|j,m\rangle = m\hbar|j,m\rangle \tag{6}
$$

式中 j 和 m 是待定的量子数．以 $|j,m\rangle$ 为基矢的表象称为 J^2 和 J_z 的共同表象，在此表象中，J^2 和 J_z 是对角矩阵(diagonal matrices)，其矩阵元分别为：

$$
\begin{aligned}
(J^2)_{j'm'jm} &= \langle j',m'|J^2|j,m\rangle \\
&= j(j+1)\hbar^2\delta_{j'j}\delta_{m'm}
\end{aligned} \tag{7}
$$

$$
\begin{aligned}
(J_z)_{j'm'jm} &= \langle j',m'|J_z|j,m\rangle \\
&= m\hbar\delta_{j'j}\delta_{m'm}
\end{aligned} \tag{8}
$$

2．升算符和降算符的意义及性质

为了找到 J_x、J_y 的矩阵表示和量子数 j、m，引入升算符和降算符是方便的．升算符 J_+ 和降算符 J_- 的定义如下：

$$
\begin{aligned}
J_+ &= J_x + iJ_y \\
J_- &= J_x - iJ_y
\end{aligned} \tag{9}
$$

根据此定义及(1)、(3)、(4)诸式，可以证明，升算符和降算符具有如下性质：

$$
J_\pm^\dagger = J_\mp \tag{10}
$$

$$J_+ J_- - J_- J_+ = 2\hbar J_z \tag{11}$$

$$J_\pm J_\mp = J^2 - J_z^2 \pm \hbar J_z \tag{12}$$

$$J_\pm J^2 - J^2 J_\pm = 0 \tag{13}$$

$$J_\pm J_z - J_z J_\pm = \mp \hbar J_\pm \tag{14}$$

例如(12)式证明如下：

$$\begin{aligned}J_+ J_- &= (J_x + iJ_y)(J_x - iJ_y)\\&= J_x^2 - iJ_xJ_y + iJ_yJ_x - i^2J_y^2\\&= J_x^2 + J_y^2 - i(J_xJ_y - J_yJ_x)\\&= J^2 - J_z^2 - i^2\hbar J_z\\&= J^2 - J_z^2 + \hbar J_z\end{aligned}$$

由(10)式可知，J_+和 J_-是非厄米算符. 下文我们将会看到，这种非厄米的升降算符也是有用的数学工具.

为了看出升、降算符的意义，将 J_zJ_+作用于 J^2 和 J_z 的共同本征矢$|j,m\rangle$上，利用(14)式和(16)式可得

$$\begin{aligned}J_zJ_+ |j,m\rangle &= (J_+ J_z + \hbar J_+)|j,m\rangle\\&= J_+ m\hbar|j,m\rangle + \hbar J_+ |j,m\rangle\\&= (m+1)\hbar J_+ |j,m\rangle\end{aligned} \tag{15}$$

同理可得

$$J_zJ_- |j,m\rangle = (m-1)\hbar J_- |j,m\rangle \tag{16}$$

又由(13)式及(5)式可得

$$J^2J_\pm |j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2|j,m\rangle \tag{17}$$

由(15)、(16)及(17)诸式可见，如果$|j,m\rangle$是 J^2 和 J_z 的共同本征刃(eigenkets)，对应的本征值分别为 $j(j+1)\hbar^2$ 和 $m\hbar$，那么$J_\pm|j,m\rangle$也是 J^2 和 J_z 的共同本征刃，对应的本征值分别为 $j(j+1)\hbar^2$ 和$(m\pm1)\hbar$. 因此，$J_\pm$对$|j,m\rangle$的作用其结果不改变量子数 j，但使量子数 m 改变一个单位，故可称 J_+为升算符，J_-为降算符. 由(15)式和(16)式可知，$J_\pm|j,m\rangle$必是$|j,m\pm1\rangle$的某一倍数，即

$$J_+ |j,m\rangle = c_+(j,m)\hbar|j,m+1\rangle \tag{18}$$

$$J_- |j,m\rangle = c_-(j,m)\hbar|j,m-1\rangle \tag{19}$$

其中 $c_\pm(j,m)$是待定的复数. 下面我们来求系数 $c_\pm$.

取(18)式的共轭，得

$$\langle j,m|J_+^\dagger = \langle j,m+1|c_+^*(j,m)\hbar$$

利用(10)式上式变成

$$\langle j,m|J_- = \langle j,m+1|c_+^*(j,m)\hbar$$

将上式左乘(18)式得

$$\langle j,m|J_-J_+|j,m\rangle = |c_+(j,m)|^2\hbar\langle j,m+1|j,m+1\rangle$$

注意到归一化条件

$$\langle j,m+1|j,m+1\rangle = 1$$

则上式变成

$$|c_+(j,m)|^2\hbar = \langle j,m|J_-J_+|j,m\rangle$$

将(12)式代入上式右端得

$$\begin{aligned}|c_+(j,m)|^2\hbar^2 &= \langle j,m|J^2 - J_z^2 - \hbar J_z|j,m\rangle \\ &= [j(j+1) - m^2 - m]\hbar^2\langle j,m|j,m\rangle \\ &= [j(j+1) - m(m+1)]\hbar^2 \\ &= (j-m)(j+m+1)\hbar^2\end{aligned}$$

于是得到

$$\begin{aligned}|c_+(j,m)|^2 &= j(j+1) - m(m+1) \\ &= (j-m)(j+m+1)\end{aligned} \tag{21}$$

如果选取 c_+ 的相因子为 1，即取 c_+ 为实数，则

$$c_+(j,m) = \sqrt{(j-m)(j+m+1)} \tag{22}$$

同理可求

$$c_-(j,m) = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \tag{23}$$

将所得(22)式和(23)式分别代入(18)式和(19)式得到

$$\begin{aligned}J_+|j,m\rangle &= \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\hbar|j,m+1\rangle \\ &= \sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\hbar|j,m+1\rangle\end{aligned} \tag{24}$$

$$\begin{aligned}J_-|j,m\rangle &= \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\hbar|j,m-1\rangle \\ &= \sqrt{j(j+1)-m(m-1)}\hbar|j,m-1\rangle\end{aligned} \tag{25}$$

于是我们可求出在 J^2 和 J_z 共同表象中，升算符 J_+ 和降算符 J_- 的矩阵元为

$$(J_+)_{j'm'jm} = \langle j', m' | J_+ | j, m \rangle$$

$$= \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\hbar\delta_{j'j}\delta_{m',m+1} \tag{26}$$

$$(J_-)_{j'm'jm} = \langle j', m' | J_- | j, m \rangle$$

$$= \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\hbar\delta_{j'j}\delta_{m',m-1} \tag{27}$$

由上两式可见，对 j' 和 j 而言，矩阵是对角的，故常略去 j 的指标. 又由 $\delta_{m',m+1}$知，仅当 $m'=m+1$ 即行数比列数大 1 时矩阵元才不为零，故(26)式(27)式可简记为

$$(J_+)_{m+1,m} = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\hbar \tag{28}$$

$$(J_-)_{m-1,m} = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\hbar \tag{29}$$

(28)式也可以写成

$$(J_+)_{m,m-1} = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\hbar \tag{30}$$

比较(29)式和(30)式可得

$$(J_+)_{m,m-1} = (J_-)_{m-1,m}$$

$$= \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\hbar \tag{31}$$

3. J^2 和 J_z 的本征值

设本征方程为

$$\left.\begin{aligned} J^2|\lambda,m\rangle &= \lambda\hbar^2|\lambda,m\rangle \\ J_z|\lambda,m\rangle &= m\hbar|\lambda,m\rangle \end{aligned}\right\} \tag{32}$$

首先证明，J^2 的本征值不小于 J_z 本征值的平方，即 $\lambda \geqslant m^2$. 事实上，由(9)式可得

$$\left.\begin{aligned} J_x &= \frac{1}{2}(J_+ + J_-) \\ J_y &= \frac{1}{2i}(J_+ - J_-) \end{aligned}\right\} \tag{33}$$

于是 $$J^2 - J_z^2 = J_x^2 + J_y^2$$

$$= [\frac{1}{2}(J_+ + J_-]^2 + [\frac{1}{2i}(J_+ - J_-)]^2$$

$$= \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+)$$

$$=\frac{1}{2}(J_\pm^\dagger J_- + J_\mp^\dagger J_+)$$

其中最后一步用了(10)式. 注意到算符 A^+A 的平均值是非负数，即

$$\langle\lambda,m|A^+A|\lambda,m\rangle \geqslant 0$$

故有

$$\langle\lambda,m|J^2 - J_z^2|\lambda,m\rangle \geqslant 0$$

将(32)式代入上式得

$$(\lambda - m^2)\hbar^2\langle\lambda,m|\lambda,m\rangle \geqslant 0$$

利用归一化条件，上式成为

$$(\lambda - m^2)\hbar^2 \geqslant 0$$

由此得到所要证明的结论：

$$\lambda \geqslant m^2$$

上式告诉我们，m 的数值受到一定的限制. 对于给定的 λ，设 m 的最大值为 j，将 J_+ 作用于 $|\lambda,m=j\rangle$，利用升算符 J_+ 的性质，应有

$$J_+|\lambda,j\rangle = 0$$

利用(12)式，得

$$J_-J_+|\lambda,j\rangle = (J^2 - J_z^2 - \hbar J_z)|\lambda,j\rangle$$
$$= (\lambda - j^2 - j)\hbar^2|\lambda,j\rangle = 0$$

由此可见

$$\lambda - j^2 - j = 0$$

即

$$\lambda = j(j+1) \tag{35}$$

设 m 的最小值为 j'，将 J_- 作用于 $|\lambda,m=j'\rangle$，利用降符符 J_- 的性质，应有

$$J_-|\lambda,j'\rangle = 0$$

再利用(12)式得

$$J_+J_-|\lambda,j'\rangle = (J^2 - J_z^2 + \hbar J_z)|\lambda,j'\rangle$$
$$= (\lambda - j'^2 + j')\hbar^2|\lambda,j'\rangle = 0$$

由此可见

$$\lambda - j'^2 + j' = 0$$

即

$$\lambda = j'(j'-1) \tag{36}$$

比较(35)式和(36)式可以看出，仅当

$$j' = -j \quad 或 \quad j' = j+1$$

时，两式才能一致，都表示本征值 λ. 但 $j'=j+1$ 没有意义，因为它与 j 是 m 的最大值和 j' 是 m 的最小值的假定矛盾. 因此只能是

$$j' = -j \tag{37}$$

成立，即 m 的最小值是 $-j$. 由上面的讨论便可得出结论.

$$-j \leqslant m \leqslant j \tag{38}$$

根据降算符 J_- 的性质，将它连续作用于 $|\lambda,m\rangle$ 时可得到 $|\lambda,m-1\rangle,|\lambda,m-2\rangle,|\lambda,m-3\rangle,\cdots$，即 J_- 对 $|\lambda,m\rangle$ 作用一次，本征值 m 减小一个单位. 因为 m 的变化范围是 $j-(-j)=2j$，它必须是非负的整数(nonnegative integer)才能保证从 $|\lambda,j\rangle$ 开始最后得到 $|\lambda,-j\rangle$. 既然 $2j$ 为非负整数，那么 j 只能是非负整数或半奇数，这样，我们便得到量子数 j 和 m 的可能值：

$$j = 0,\frac{1}{2},1,\frac{3}{2},2,\cdots \tag{39}$$

$$m = j,j-1,j-2,\cdots,-(j-1),-j \tag{40}$$

即对于给定的 j 值，m 可取 $(2j+1)$ 个值，如(40)式所示. 这时本征方程(32)式便可写成

$$\left.\begin{aligned} J^2|j,m\rangle &= j(j+1)\hbar^2|j,m\rangle \\ J_z|j,m\rangle &= m\hbar|j,m\rangle \end{aligned}\right\} \tag{41}$$

显而易见，J^2 和 J_z 的本征值为

$$\left.\begin{aligned} J^2 &= j(j+1)\hbar^2 \\ J_z &= m\hbar \end{aligned}\right\} \tag{42}$$

4. 角动量的矩阵元

J^2 和 J_z 的矩阵元已用(7)式和(8)式表示. 现在我们求在 J^2 和 J_z 共同表象中，J_x 和 J_y 的矩阵元.

将(31)式代入(33)式第一式得

$$\begin{aligned} (J_x)_{m,m-1} &= \frac{1}{2}[(J_+)_{m,m-1} + (J_-)_{m,m-1}] \\ &= \frac{1}{2}(J_+)_{m,m-1} \\ &= \frac{h}{2}\sqrt{(j+m)(j-m+1)} \end{aligned} \tag{43}$$

其中考虑了$(J_-)_{m,m-1}=0$. 又

$$(J_x)_{m-1,m}=\frac{1}{2}[(J_+)_{m-1,m}+(J_-)_{m-1,m}]$$
$$=\frac{1}{2}(J_-)_{m-1,m}$$
$$=\frac{\hbar}{2}\sqrt{(j+m)(j-m+1)} \tag{44}$$

其中考虑了$(J_+)_{m-1,m}=0$. 比较(43)式和(44)式可知

$$(J_x)_{m,m-1}=(J_x)_{m-1,m}$$
$$=\frac{\hbar}{2}\sqrt{(j+m)(j-m+1)} \tag{45}$$

同理可求

$$(J_y)_{m,m-1}=\frac{\hbar}{2i}\sqrt{(j+m)(j-m+1)} \tag{46}$$

$$(J_y)_{m-1,m}=\frac{\hbar}{2i}\sqrt{(j+m)(j-m+1)} \tag{47}$$

以及
$$(J_y)_{m,m-1}=-(J_y)_{m-1,m}$$
$$=\frac{\hbar}{2i}\sqrt{(j+m)(j-m+1)} \tag{48}$$

下面我们以 $j=0,\frac{1}{2},1$ 为例，求出 J_x,J_y,J_z 的矩阵表示.

当 $j=0$ 时，结果是明显的，所有矩阵都是一阶的，矩阵元为零.

当 $j=\frac{1}{2}$时，$m=\frac{1}{2},-\frac{1}{2}$. 由(8)式可求得

$$\begin{cases}\langle\frac{1}{2},\frac{1}{2}|J_z|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle=\frac{\hbar}{2}\\ \langle\frac{1}{2},\frac{1}{2}|J_z|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle=0\\ \langle\frac{1}{2},-\frac{1}{2}|J_z|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle=0\\ \langle\frac{1}{2},-\frac{1}{2}|J_z|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle=\frac{\hbar}{2}\end{cases}$$

于是得
$$J_z=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \tag{49a}$$
其本征矢为
$$\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix},\quad \left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} \tag{50}$$
由(45)式得
$$(J_x)_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}=(J_x)_{-\frac{1}{2},\frac{1}{2}}=\frac{\hbar}{2}$$
于是
$$J_x=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix} \tag{49b}$$
又由(48)式得
$$(J_y)_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}}=-(J_y)_{-\frac{1}{2},\frac{1}{2}}=\frac{\hbar}{2i}$$
于是
$$J_y=\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix} \tag{49c}$$
如果我们定义
$$\boldsymbol{J}=\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma} \tag{51}$$
则有
$$\sigma_x=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},\quad \sigma_y=\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix},\quad \sigma_z=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \tag{52}$$
这就是泡利自旋矩阵.

对 $j=1$，m 可取值 $1,0,-1$. 类似地，我们可以得到
$$J_x=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\end{bmatrix}, \tag{53a}$$
$$J_y=\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0 & -i & 0\\ i & 0 & -i\\ 0 & i & 0\end{bmatrix}, \tag{53b}$$

$$J_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{53c}$$

J_z的本征矢是

$$|1,1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1,0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1,-1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{54}$$

§3　转动群及其表示

1. 用欧拉角表示空间转动

在第六章§5中，我们用三个实参数 $\boldsymbol{a}=(a_1,a_2,a_3)$ 描述空间转动，本章§1，我们又用 $\boldsymbol{a}=a\boldsymbol{u}$ 即给定转动轴的单位矢量 $\boldsymbol{u}$（或两极角 θ 和 φ）以及转角 a 来描述转动. 现在我们用欧拉角 (α,β,γ) 来描述绕空间固定点的一般转动 $R(\alpha,\beta,\gamma)$.

在第一篇第四章图 4-3 中，坐标轴 0-xyz 代表转动前的位置，0-$\xi\eta\zeta$ 代表转动后的位置. 绕固定点的空间转动可由下述三个相继的转动实现：(1) 先绕 z 轴转 α 角，使 0-xyz 转到 0-$x'y'z$；(2) 再绕新 y 轴（即 y'）轴转 β 角，使 0-$x'y'z$ 转到 0-$x''y'\zeta$；(3) 最后绕新 z 轴（即 ζ 轴）转 γ 角，使 0-$x''y'\zeta$ 转为 0-$\xi\eta\zeta$. 于是，绕固定点的空间转动可表示为

$$R(\alpha,\beta,\gamma) = R_\zeta(\gamma)R_{y'}(\beta)R_z(\alpha) \tag{1}$$

式中转角 α,β,γ 的取值范围分别是

$$0\leqslant\alpha\leqslant 2\pi,\quad 0\leqslant\beta\leqslant\pi,\quad 0\leqslant\gamma\leqslant 2\pi \tag{2}$$

由图 4-3 可以看出，若把 0-$\xi\eta\zeta$ 依次作转动 $R_z(-\alpha)$、$R_y(-\beta)$、$R_z(-\gamma)$ 则 0-$\xi\eta\zeta$ 可还原为 0-xyz. 显然，这个转动就是 $R(\alpha,\beta,\gamma)$ 的逆转动：

$$R^{-1}(\alpha,\beta,\gamma) = R_z(-\gamma)R_y(-\beta)R_z(-\alpha) \tag{3}$$

由 $R^{-}R=RR^{-1}=E$ 可知，$R(\alpha,\beta,\gamma)$ 亦可表为

$$R(\alpha,\beta,\gamma) = R_z(\alpha)R_y(\beta)R_z(\gamma) \tag{4}$$

上式告诉我们，从 0-xyz 到 0-$\xi\eta\zeta$ 的转动也可以按另一步骤来实现，即(1)先绕 z 轴转 γ 角；(2)再绕 y 轴转 β 角；(3)最后绕 z 轴转 α 角. 这就是说，(4)式和(1)式是对绕固定点的空间转动的等价描述. 但(4)式更便于应用，因为这种转动是在同一坐标系 0-xyz 中进行的，而(1)式表示的转动是在不同的坐标系中进行的.

2. 转动群及其表示

全部空间转动 $R(\alpha,\beta,\gamma)$ 构成一个三维空间转动群，记为 SO_3，它是连续群，但不是阿贝尔群. (α,β,γ) 的一组值确定群的一个元素. 封闭性是明显的，因为相继施行两个转动 $R(\alpha_2,\beta_2,\gamma_2)$ 和 $R(\alpha_1,\beta_1,\gamma_1)$ 的结果仍是一个转动 $R(\alpha_3,\beta_3,\gamma_3)=R(\alpha_2,\beta_2,\gamma_2)R(\alpha_1,\beta_1,\gamma_1)$，其中

$$\alpha_3=\alpha_1+\alpha_2, \quad \beta_3=\beta_1+\beta_2, \quad \gamma_3=\gamma_1+\gamma_2 \tag{5}$$

$R(\alpha,\beta,\gamma)$ 的单位元也存在，就是

$$R(0,0,0)=1 \tag{6}$$

而 $R(\alpha,\beta,\gamma)$ 的逆元素是

$$R^{-1}(\alpha,\beta,\gamma)=R(-\gamma,\ -\beta,\ -\alpha) \tag{7}$$

最后，结合律也是满足的. 于是，全部空间转动构成群.

现在我们来讨论转动群的表示. §1(37)式表示绕任意轴 $\boldsymbol{u}$ 转过任意角度 α 的几何转动 $R_u(\alpha)$ 与态空间对应的转动算符：

$$U[R_u(\alpha)]=\exp(-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{J}) \tag{8}$$

由此可得到，对应于几何转动 $R_\zeta(\gamma)$，$R_{y'}(\beta)$，$R_z(\alpha)$ 的转动算符分别是

$$\left.\begin{aligned} U[R_\zeta(\gamma)]&=\exp(-\frac{i}{\hbar}\gamma J_\zeta)\\ U[R_{y'}(\beta)]&=\exp(-\frac{i}{\hbar}\beta J_{y'})\\ U[R_z(\alpha)]&=\exp(-\frac{i}{\hbar}\alpha J_z)\end{aligned}\right\} \tag{9}$$

其中 J_z、$J_{y'}$、J_ζ 分别表示角动量沿 z 轴、y' 轴、ζ 轴的分量. 于是，与(1)式表示的转动相对应的转动算符为

$$U[R(\alpha,\beta,\gamma)]=U[R_\zeta(\gamma)]U[R_{y'}(\beta)]U[R_z(\alpha)]$$
$$=\exp(-\frac{i}{\hbar}\gamma J_\zeta)\exp(-\frac{i}{\hbar}\beta J_{y'})\exp(-\frac{i}{\hbar}\alpha J_z) \quad (10)$$

考虑到同一空间转动既可用(1)式表示，也可用等价的(4)式表示，这样，与(4)式对应的转动算符可表示为

$$U[R(\alpha,\beta,\gamma)]=\exp(-\frac{i}{\hbar}\alpha J_z)\exp(-\frac{i}{\hbar}\beta J_y)\exp(-\frac{i}{\hbar}\gamma J_z) \quad (11)$$

由(4)式与(1)式的等价性可推知，(11)式与(10)式也是等价的．此等价性也可以由以下考虑得出．

我们知道，一个幺正变换 U 把算符 A 变为

$$A'=UAU^+ \quad (12)$$

如果我们把 $U[R_z(\alpha)]$ 看作 U，则可认为 $U[R_{y'}(\beta)]$ 是在前一次转动 $U[R_z(\alpha)]$（它把 y 轴转到 y' 轴）下 $e^{-\frac{i}{\hbar}\beta J_y}$ 的变换式，即

$$\exp(-\frac{i}{\hbar}\beta J_{y'})=\exp(-\frac{i}{\hbar}\alpha J_z)\exp(-\frac{i}{\hbar}\beta J_y)\exp(\frac{i}{\hbar}\alpha J_z) \quad (13)$$

上式的含义是，绕 y' 轴转角为 β 的转动，等价于先绕 z 轴逆转 α 角，再绕 y 轴转 β 角，然后绕 z 轴正转 α 角．同样，$U[R_\zeta(\gamma)]$ 可认为是在把 z 轴转到 z' 轴的变换 $U[R_{y'}(\beta)]$（看作是幺正变换）下 $e^{-\frac{i}{\hbar}\gamma J_z}$ 的变换式，即

$$\exp(-\frac{i}{\hbar}\gamma J_\zeta)=\exp(-\frac{i}{\hbar}\beta J_{y'})\exp(-\frac{i}{\hbar}\gamma J_z)\exp(\frac{i}{\hbar}\beta J_{y'}) \quad (14)$$

其含义是，绕 ζ 轴转角为 γ 的转动，等价于先绕 y' 轴逆转 β 角，再绕 z 轴转 γ 角，最后绕 y' 轴正转 β 角．

将(13)和(14)两式代入(10)式得

$$U[R(\alpha,\beta,\gamma)]$$
$$=\exp(-\frac{i}{\hbar}\alpha J_z)\exp(-\frac{i}{\hbar}\beta J_y)\exp(\frac{i}{\hbar}\alpha J_z)\exp(-\frac{i}{\hbar}\gamma J_z)\exp(-\frac{i}{\hbar}\alpha J_z) \quad (15)$$

注意到对同一个 z 轴转角为 α 和转角为 γ 的两个转动是可对易的，即

$$\exp(-\frac{i}{\hbar}\gamma J_z)\exp(-\frac{i}{\hbar}\alpha J_z) = \exp(-\frac{i}{\hbar}\alpha J_z)\exp(-\frac{i}{\hbar}\gamma J_z)$$

于是，(15)式成为

$$U[R(\alpha,\beta,\gamma)] = \exp(-\frac{i}{\hbar}\alpha J_z)\exp(-\frac{i}{\hbar}\beta J_y)\exp(-\frac{i}{\hbar}\gamma J_z)$$

这就是(11)式，可见(10)式与(11)式是等价的.

转动算符 $U[R(\alpha,\beta,\gamma)]$ 的集合是转动群 SO_3 在态空间中的表示，即对于

$$R_2R_1 = R_3 \tag{16}$$

存在

$$U(R_2)U(R_1) = U(R_2R_1) = U(R_3) \tag{17}$$

式中

$$R_j \equiv R(\alpha_j,\beta_j,\gamma_j), \qquad U(R_j) \equiv U[R(\alpha_j,\beta_j,\gamma_j)],$$
$$j = 1,2,3,\cdots \tag{18}$$

令 $|j,m\rangle$ 是 J^2 和 J_z 的共同本征态，转动后的态为 $U[R(\alpha,\beta,\gamma)]|j,m\rangle$. 考虑到 J^2 与 $\boldsymbol{J}$ 的每一个分量都对易，则由(11)式可得

$$[J^2,U(R(\alpha,\beta,\gamma))] = 0 \tag{19}$$

将 J^2 作用于转动后的态 $U[R(\alpha,\beta,\gamma)]|j,m\rangle$，得到

$$\begin{aligned} J^2U[R(\alpha,\beta,\gamma)]|j,m\rangle &= U[R(\alpha,\beta,\gamma)]J^2|j,m\rangle \\ &= j(j+1)\hbar^2U[R(\alpha,\beta,\gamma)]|j,m\rangle \end{aligned} \tag{20}$$

可见 $U[R(\alpha,\beta,\gamma)]|j,m\rangle$ 就是 J^2 的本征值为 $j(j+1)\hbar^2$ 的一个本征矢. 但一般说来，J_z 与 $U[R(\alpha,\beta,\gamma)]$ 不对易. 因此，$U[R(\alpha,\beta,\gamma)]|j,m\rangle$ 一般不再是 J_z 的本征态，而是 J_z 的各种本征态的线性迭加，可写成

$$U(R)|j,m\rangle = \sum_{m'=-j}^{j} D^{(j)}_{m'm}(R)|j,m'\rangle \tag{21}$$

为了书写简洁，上式已将 $U[R(\alpha,\beta,\gamma)]$ 中的宗量 (α,β,γ) 省略，$D^{(j)}_{m'm}[R(\alpha,\beta,\gamma)]$ 亦可略写成 $D^{(j)}_{m'm}(R)$，以下的式子都作同样的简写.

(21)式中线性组合系数 $D^{(j)}_{m'm}(R)$ 待确定，它们是如下的矩阵元：

$$D^{(j)}_{m'm}(R) = \langle j,m'|U(R)|j,m\rangle \tag{22}$$

对于固定的 j，它们是一个 $2j+1$ 阶矩阵的元素，因为 m 和 m' 是以间隔 1 从 $-j$ 变到 $+j$ 的. 上式是转动算符 $U(R)$ 在角动量本征

态$|j,m\rangle$和$|j,m'\rangle$之间的矩阵元.

现在我们将(17)式左端两个转动算符的乘积作用于$|j,m\rangle$上,注意到(21)式便有

$$
\begin{aligned}
U(R_2)U(R_1)|j,m\rangle &= U(R_2)\sum_{m''}D^{(j)}_{m''m}(R_1)|j,m''\rangle \\
&= \sum_{m''}D^{(j)}_{m''m}(R_1)\sum_{m'}D^{(j)}_{m'm''}(R_1)|j,m'\rangle \\
&= \sum_{m'}\{\sum_{m''}D^{(j)}_{m'm''}(R_2)D^{(j)}_{m''m}(R_1)\}|j,m'\rangle \qquad (23)
\end{aligned}
$$

另一方面,(17)式右端的转动算符作用于$|j,m\rangle$上,得

$$
U(R_3)|j,m\rangle = \sum_{m'}D^{(j)}_{m'm}(R_3)|j,m'\rangle \qquad (24)
$$

比较以上两式并注意到(17)式,得到

$$
\begin{aligned}
D^{(j)}_{m'm}(R_3) &= \sum_{m''}D^{(j)}_{m'm''}(R_2)D^{(j)}_{m''m}(R_1) \\
&= [D^{(j)}(R_2)D^{(j)}(R_1)]_{m'm} \qquad (25)
\end{aligned}
$$

由此得矩阵关系为

$$
D^{(j)}(R_3) = D^{(j)}(R_2)D^{(j)}(R_1) \qquad (26)
$$

我们知道,一组矩阵如果它们与群元素有着相同的乘法规则,则称它们构成该群的一个表示.比较(26)式与(17)式和(16)式可知,矩阵$D^{(j)}(R)$的集合就是转动群的表示.即对于每一个以(α,β,γ)为参数的转动$R(\alpha,\beta,\gamma)$,都有一个矩阵元为$D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)$的矩阵$D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)$与之对应,这些矩阵构成一个$2j+1$维的表示.对于每一个$j$有一个表示.我们称$D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)$为转动矩阵.

为求$D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)$的明显表达式,将(11)式代入(22)式得到角动量表象中$D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)$的矩阵元:

$$
\begin{aligned}
D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma) &= \langle j,m'|U[R(\alpha,\beta,\gamma)]|j,m\rangle \\
&= \langle j,m'|e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha J_z}e^{-\frac{i}{\hbar}\beta J_y}e^{-\frac{i}{\hbar}\gamma J_z}|j,m\rangle \\
&= e^{-im'\alpha}e^{-im\gamma}\langle j,m'|e^{-\frac{i}{\hbar}\beta J_y}|j,m\rangle \qquad (27)
\end{aligned}
$$

$e^{-\frac{i}{\hbar}\beta J_y}$在这种表象中不是对角的,令它的矩阵元为$d^{(j)}_{m'm}(\beta)$,即

$$
d^{(j)}_{m'm}(\beta) = \langle j,m'|e^{-\frac{i}{\hbar}\beta J_y}|j,m\rangle \qquad (28)
$$

这样，(27)式便可表为

$$D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)=e^{-im'\alpha}e^{-im\gamma}d^{(j)}_{m'm}(\beta) \tag{29}$$

由上式可知，矩阵元 $D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)$ 对 α 和 γ 的依赖关系是明显的，但其中 $d^{(j)}_{m'm}(\beta)$ 的计算却相当困难. 维格纳作出了 $d^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)$ 的计算①. 函数 $D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)$ 称为维格纳函数，或推广的球谐函数，或 D-函数.

在第一篇第四章 § 7 中求出了 $D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)$ 的明显表达式. 现给出 $j=\frac{1}{2}$ 和 $j=1$ 时的 $d^{1/2}_{m'm}(\beta)$ 和 $d^{1}_{m'm}(\beta)$ 如下：

$$d^{1/2}_{m'm}(\beta)=\begin{pmatrix}\cos\frac{\beta}{2} & \sin\frac{\beta}{2}\\ -\sin\frac{\beta}{2} & \cos\frac{\beta}{2}\end{pmatrix} \tag{30}$$

$$D^{1}_{m'm}(\beta)=\begin{pmatrix}\frac{1+\cos\beta}{2} & \frac{\sin\beta}{\sqrt{2}} & \frac{1-\cos\beta}{2}\\ \frac{-\sin\beta}{\sqrt{2}} & \cos\beta & \frac{\sin\beta}{\sqrt{2}}\\ \frac{1-\cos\beta}{2} & \frac{-\sin\beta}{\sqrt{2}} & \frac{1+\cos\beta}{2}\end{pmatrix} \tag{31}$$

矩阵 $D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)$ 的集合构成三维转动群的一个表示. 当 j 是整数时，此表示是单值的；而当 j 为半奇数时，此表示是双值的. 为了说明这点，我们考虑 $\beta=\gamma=0$ 的一个转动，这时(29)式变成

$$D^{(j)}_{m'm}(\alpha,0,0)=e^{-im'\alpha}\delta_{m'm}$$

$$=\begin{pmatrix}e^{-ij\alpha} & & & \\ & e^{-i(j-1)\alpha} & & 0\\ & & \ddots & \\ 0 & & & \ddots \\ & & & & e^{ij\alpha}\end{pmatrix} \tag{32}$$

因为转动 2π 等价于不转动，对于 $\alpha=2\pi$，当 j 是整数时，(32)式给

① 参阅 Eugene P. Wigner, Group Theory and Its Application to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra, Chapter 15.

出一个单位矩阵；但当 j 是半奇数时，(32)式给出一个负单位矩阵. 故当 j 为半奇数时，恒等算符既用单位矩阵又用负单位矩阵来表示. 对应于半奇数 j 时的角动量矩阵不能表示纯轨道角动量，它们只在有自旋时出现，而自旋则纯粹是粒子的量子力学属性.

3. 转动群表示的约化和不可约表示

前面说过，$D^{(j)}_{m'm}(\alpha,\beta,\gamma)$是转动算符 $U[R(\alpha,\beta,\gamma)]$在角动量本征态$|j,m\rangle$和$|j,m'\rangle$之间的矩阵元，转动矩阵 $D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)$的集合$\{D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)\}$构成转动群 SO_3 的表示. 一般地说，如果在态矢量空间中取定某一表象，即取定一组正交归一和完备的基$\{|a\rangle\}$，则每一个转动算符 $U_i\equiv U[R(\alpha_i,\beta_i,\gamma_i)]$就能表示为一个矩阵：

$$D_i\equiv D_i(\alpha_i,\beta_i,\gamma_i)=\sum_{a,a'}|a\rangle\langle a|U_i|a'\rangle\langle a'| \tag{33}$$

通常把 D 称为转动矩阵. 显然，转动矩阵 $D(\alpha,\beta,\gamma)$的集合$\{D(\alpha,\beta,\gamma)\}$构成群. 这是因为 $D=E$ 对应于 $U=E$，D^{-1}与 U^{-1}对应，而且 D_1D_2 与 U_1U_2 对应：

$$\begin{aligned}D_1D_2&=\sum_{a,a'}|a\rangle\langle a|U_1|a'\rangle\langle a'|\cdot\sum_{a'',a'''}|a''\rangle\langle a''|U_2|a'''\rangle\langle a'''|\\&=\sum_{a,a'}|a\rangle\langle a|U_1U_2|a'\rangle\langle a'|\end{aligned} \tag{34}$$

我们把这个群称为转动算符的矩阵表示，也就是转动群 SO_3 的表示. 这个表示矩阵的维数称为表示的维数. 因为(33)式的维数是无限的，所以，转动群 SO_3 的表示$\{D(\alpha,\beta,\gamma)\}$也是无限维的.

现在过渡到角动量表象，基矢为$\{|j,m\rangle\}$，$j=0,\frac{1}{2},1,\cdots,m=-j,-j+1,\cdots,j-1,j$. 在此表象中，

$$D=\sum_{j',m'}\sum_{j,m}|j',m'\rangle\langle j',m'|U|j,m\rangle\langle j,m| \tag{35}$$

注意到(19)式，U 不改变总角动量量子数 j，故

$$\langle j',m'|U|j,m\rangle=,D^{(j)}_{m'm}\delta_{j'j} \tag{36}$$

$$D^{(j)}_{m'm}=\langle j,m'|U|j,m\rangle$$

与(22)式相同.

这样，(35)式变成

$$D = \sum_j \sum_{m'm} |j,m'\rangle D^{(j)}_{m'm} \langle j,m|$$

$$= \sum_j D^{(j)} \tag{37}$$

式中
$$D^{(j)} = \sum_{m'm} |j,m'\rangle D^{(j)}_{m'm} \langle j,m| \tag{38}$$

(37)式表为

$$D = D^{(0)} + D^{(1/2)} + D^{(1)} + \cdots$$

$$= \begin{pmatrix} D^{(0)} & & & 0 \\ & \square & & \\ & & \square & \\ 0 & & & \ddots \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \square & & & 0 \\ & D^{(1/2)} & & \\ & & \square & \\ 0 & & & \ddots \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \square & & & 0 \\ & \square & & \\ & & D^{(1)} & \\ 0 & & & \ddots \end{pmatrix} + \cdots$$

$$= \begin{pmatrix} D^{(0)} & & & & 0 \\ & D^{(1/2)} & & & \\ & & D^{(1)} & & \\ & & & D^{(3/2)} & \\ 0 & & & & \ddots \end{pmatrix} \tag{39}$$

式中左边的 D 是整个角动量空间中的矩阵，维数无限，它可以表为块对角矩阵形式，故右边的 $D^{(j)}$是$(2j+1)$维子空间中的矩阵，维数 $l=2j+1=1,2,3,\cdots$. 对于不同的 j, $D^{(j)}$属于不同的子空间: $D^{(0)}$属于一维子空间，$D^{(1/2)}$属于二维子空间，$D^{(1)}$属于三维子空间，等等.

块对角形式的(39)式就是矩阵的直和(见第一篇第二章§12)，记作

$$D = \dot{\sum_j} D^{(j)} = D^{(0)} \oplus D^{(1/2)} \oplus D^{(1)} \oplus \cdots \tag{40}$$

由此可见，把表象变换到角动量表象时，表示$\{D(\alpha,\beta,\gamma)\}$分解为各个表示$\{D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)\}$的直和. 这种表象变换的手续称为表示的约化. 表示$\{\{D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)\}$的维数是 $2j+1$ 维的，即 $D^{(0)}$是一维表示，$D^{(1/2)}$是二维子表示，$D^{(1)}$是三维表示，等等. 因为 $U[R(\alpha,\beta,\gamma)]$一般与 J_z 不对易，故它不能使磁量子数 m 保持不变，因而 $D^{(j)}$

不能进一步被约化，即是说，$\{D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)\}$是转动群的 $2j+1$ 维不可约表示. 因此，(40)式又可理解为表示$\{D(\alpha,\beta,\gamma)\}$约化为不可约表示$\{D^{(j)}(\alpha,\beta,\gamma)\}$的直和.

§4 两个角动量的耦合

1. 总角动量的定义及其性质

在经典力学中，如果一个体系具有角动量 J_1，另一个体系具有角动量 J_2，则耦合体系的总角动量简单地就是

$$J = J_1 + J_2 \tag{1}$$

在量子力学中，J_1 和 J_2 都是算符，且满足下列对易关系：

$$\left.\begin{aligned} J_1 \times J_1 &= i\hbar J_1 \\ J_2 \times J_2 &= i\hbar J_2 \end{aligned}\right\} \tag{2}$$

因为 J_1 和 J_2 作用于各自的体系，我们就假定它们之间是可对易的，由此可以得到

$$J \times J = i\hbar J$$

或 $$[J_x,J_y] = i\hbar J_z,\quad [J_y,J_z] = i\hbar J_x,\quad [J_z,J_x] = i\hbar J_y. \tag{4}$$

可见 $J=J_1+J_2$ 也满足角动量的一般意义，所以 J 也是一个角动量，称为耦合体系的总角动量.

设 J_1^2 及 J_{1z}的共同本征矢为$|j_1,m_1\rangle$，J_2^2 及 J_{2z}的共同本征矢为$|j_2,m_2\rangle$，则有

$$\left.\begin{aligned} J_1^2|j_1,m_1\rangle &= j_1(j_1+1)\hbar^2|j_1,m_1\rangle \\ J_{1z}|j_1,m_1\rangle &= m_1\hbar|j_1,m_1\rangle \\ J_2^2|j_2,m_2\rangle &= j_2(j_2+1)\hbar^2|j_2,m_2\rangle \\ J_{2z}|j_2,m_2\rangle &= m_2\hbar|j_2,m_2\rangle \end{aligned}\right\} \tag{5}$$

而$|j_1,m_1\rangle$和$|j_2,m_2\rangle$的直积

$$|j_1,j_2,m_1,m_2\rangle = |j_1,m_1\rangle|j_2,m_2\rangle \tag{6}$$

则是 J_1^2,J_{1z}和 J_2^2,J_{2z}的共同本征矢，组成正交归一的完全系，它们构成$(2j_1+1)(2j_2+1)$维直积空间的一个基，这是因为给定 j_1 和 j_2 时有$(2j_1+1)(2j_2+1)$个本征矢$|j_1,j_2,m_1,m_2\rangle$. 以它们作基矢的

表象叫非耦合表象.

这$(2j_1+1)(2j_2+1)$个本征矢按照群SU_2的两个不可约表示的直积表示$D^{(j_1)}\otimes D^{(j_2)}$变换,此表示可约化为不可约表示的直和:

$$D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)} = \sum_{J=|j-j|}^{j+j} D^{(J)} \tag{7}$$

其中每个不可约表示$D^{(J)}$出现一次.上式称为克莱布许-高登(Clebsch-Gordan)级数.

两个角动量相加的问题就是已知两角动量的本征值和本征矢,求总角动量的本征值和本征矢.

现在考虑

$$J^2 = J_1^2 + J_2^2 + 2J_1 \cdot J_2 \tag{8}$$

因为J_1^2和J_2^2与J_1和J_2的全部分量都对易,因而也限J的每一个分量对易,所以可以证明

$$[J_1^2, J^2] = [J_2^2, J^2] = 0 \tag{9}$$

及
$$[J^2, J_z] = [J_1^2, J_z] = [J_2^2, J_z] = 0 \tag{10}$$

式中
$$J_z = J_{1z} + J_{2z} \tag{11}$$

由(9)式和(10)式可以看出,J^2, J_z, J_1^2及J_2^2构成对易算符的一个集合,因此,它们具有共同的本征矢,记为$|j_1,j_2,j,m\rangle$,从而有

$$\left.\begin{aligned} J_1^2|j_1,j_2,j,m\rangle &= j_1(j_1+1)\hbar^2|j_1,j_2,j,m\rangle \\ J_2^2|j_1,j_2,j,m\rangle &= j_2(j_2+1)\hbar^2|j_1,j_2,j,m\rangle \\ J^2|j_1,j_2,j,m\rangle &= j(j+1)\hbar^2|j_1,j_2,j,m\rangle \\ J_z|j_1,j_2,j,m\rangle &= m\hbar|j_1,j_2,j,m\rangle \end{aligned}\right\} \tag{12}$$

$|j_1,j_2,j,m\rangle$也组成正交归一的完全系.以$|j_1,j_2,j,m\rangle$作基矢的表象叫耦合表象.我们的任务便是求出总角动量J^2和J_z的本征值$j(j+1)\hbar^2$和$m\hbar$(即确定量子数j和m的取值)以及求出J^2和J_z的共同本征矢$|j_1,j_2,j,m\rangle$,也就是要找寻两组态矢$|j_1,j_2,j,m\rangle$与$|j_1,j_2,m_1,m_2\rangle$之间的关系.

现在，将$|j_1,j_2,j,m\rangle$按正交归一完全系$|j_1,j_2,m_1,m_2\rangle$展开①

$$|j_1,j_2,j,m\rangle = \sum_{m_1m_2}|j_1,j_2,m_1,m_2\rangle\langle j_1,j_2,m_1,m_2|j_1,j_2,j,m\rangle \quad (13)$$

式中系数$\langle j_1,j_2,m_1,m_2|j_1,j_2,j,m\rangle$称为C.G.系数，或维格纳系数，或矢量耦合系数. 上式表示非耦合表象基矢$|j_1,j_2,m_1,m_2\rangle$与耦合表象基矢$|j_1,j_2,j,m\rangle$之间的变换关系，它是一个幺正变换，矢量耦合系数就是幺正矩阵的矩阵元. 由(13)式可知，求耦合表象基矢$|j_1,j_2,j,m\rangle$归结为求C.G.系数.

将$J_z=J_{1z}+J_{2z}$作用于(13)式两边，注意到

$$J_z|j_1,j_2,j,m\rangle = m\hbar|j_1,j_2,j,m\rangle$$

$$(J_{1z}+J_{2z})|j_1,j_2,m_1,m_2\rangle = (m_1+m_2)\hbar|j_1,j_2,m_1,m_2\rangle$$

可得

$$m|j_1,j_2,j,m\rangle = \sum_{m_1m_2}(m_1+m_2)|j_1,j_2,m_1,m_2\rangle\langle j_1,j_2,m_1,m_2|j_1,j_2,j,m\rangle$$

即

$$\sum_{m_1m_2}(m-m_1-m_2)|j_1,j_2,m_1,m_2\rangle\langle j_1,j_2,m_1,m_2|j_1,j_2,j,m\rangle = 0 \quad (14)$$

在$(1j_1+1)(2j_2+1)$维的子空间中，$|j_1,j_2,m_1,m_2\rangle$是$(2j_1+1)(2j_2+1)$个彼此独立的正交基矢，因此(14)式中所有系数必为零，即

$$(m-m_1-m_2)\langle j_1,j_2,m_1,m_2|j_1,j_2,j,m\rangle = 0 \quad (15)$$

由此可知，当$m\neq m_1+m_2$时$\langle j_1,j_2,m_1,m_2|j_1,j_2,j,m\rangle$必为零，只当

$$m = m_1+m_2 \quad (16)$$

时，$\langle j_1,j_2,m_1,m_2|j_1,j_2,j,m\rangle$才可能不为零. 因此，(13)式中求和指标并非彼此独立的，由(16)式知$m_2=m-m_1$（或$m_1=m-m_2$）故(13)式可改写成：

$$|j_1,j_2,j,m\rangle$$

---

① 此处采用Condon和Shortley一书的符号. 见E. H. Condon and G. H. Shortley, Theory of Atomic Spectra, Cambridge University Press, 1935.

$$= \sum_{m_1} |j_1, j_2, m_1, m - m_1\rangle \langle j_1, j_2, m_1, m - m_1 | j_1, j_2, j, m\rangle \quad (17)$$

或

$$|j_1, j_2, j, m\rangle$$
$$= \sum_{m_2} |j_1, j_2, m - m_2, m_2\rangle \langle j_1, j_2, m - m_2, m_2 | j_1, j_2, j, m\rangle \quad (18)$$

2. j 的取值范围

在求 C.G. 系数 $\langle j_1, j_2, m_1, m-m_1 | j_1, j_2, j, m\rangle$ 之前，先求 j 和 j_1，j_2 之间的关系，即确定 j 的取值范围，从而求出 J^2 和 J_z 的本征值.

因为 m, m_1, m_2 的最大值依次是 j, j_1, j_2，而且 $m=m_1+m_2$，所以 j 的最大值是

$$j_{max} = j_1 + j_2 \quad (19)$$

又因为 m 的取值是 $j, j-1, \cdots, -j+1, -j$ 共 $2j+1$ 个值，逐次减 1，故 j 的取值也应从 j_1+j_2 开始逐次减 1，即 $j_1+j_2, j_1+j_2-1, j_1+j_2-2, \cdots$，但 j 的最小值 $j_{min}=$? 当 j_1 给定时，m_1 取 $2j_1+1$ 个值，对应于 $2j_1+1$ 个 $|j_1, m_1\rangle$. 同样，j_2 给定时，m_2 取 $2j_2+1$ 个值，对应于 $2j_2+1$ 个 $|j_2, m_2\rangle$. 于是，当 j_1, j_2 给定时，对应 $(2j_1+1)(2j_2+1)$ 个 $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle$，它们构成 $(2j_1+1)(2j_2+1)$ 维子空间. 另一方面，由(13)式或(17)式知 $|j_1, j_2, j, m\rangle$ 是 $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$ 的线性组合，相互独立的 $|j_1, j_2, j, m\rangle$ 的数目也是 $(2j_1+1)(2j_2+1)$ 个，这些 $|j_1, j_2, j, m\rangle$ 对应于不同的 j 和 m. 对于一个 j，m 可取 $2j+1$ 个值，因此，

$$\sum_{j_{min}}^{j_{max}} (2j+1) = (2j_1+1)(2j_2+1) \quad (20)$$

利用等差级数求和公式可求出

$$\sum_{j_{min}}^{j_{max}} (2j+1) = (j_{max}+1)^2 - j_{min}^2$$

将上式及(19)式代入(20)式得

$$j_{min}^2 = (j_1 - j_2)^2$$

故

$$j_{min} = |j_1 - j_2| \quad (21)$$

于是，求得 j 的取值范围为

$$j = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2, \cdots, |j_1 - j_2| \tag{22}$$

显然，角量子数 j 满足所谓三角形条件

$$|j_1 - j_2| \leqslant j \leqslant j_1 + j_2 \tag{23}$$

如图 7-2 所示.

j, m 取值确定之后，J^2 及 J_z 的本征值问题便解决了(见(12)式). 至于求 J^2 和 J_z 的本征矢，上文提到归结为求 C.G. 系数.



图 7-2

3. C.G. 系数的正交关系

因为 $|j_1, j_2, j, m\rangle$ 和 $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$ 都是正交归一的，即

$$\langle j_1, j_2, j', m' | j_1, j_2, j, m\rangle = \delta_{j'j}\delta_{m'm} \tag{24}$$

$$\langle j_1, j_2, m_1', m_2' | j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = \delta_{m_1'm_1}\delta_{m_2'm_2} \tag{25}$$

或
$$\langle j_1, j_2, m_1', m' - m_1' | j_1, j_2, m_1, m - m_1\rangle = \delta_{m_1'm_1}\delta_{m'm} \tag{26}$$

由此可以得到 C.G. 系数的正交关系. 因为(13)式中的变换矩阵是幺正的，并且为了方便选取它的矩阵元为实数，故有

$$\langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, j, m\rangle^* = \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, j, m\rangle \tag{27}$$

现将(13)式代入(24)式得

$$\sum_{m_1'm_2'}\sum_{m_1m_2}\langle j_1, j_2, m_1', m_2' | j_1, j_2, j, m\rangle^* \langle j_1, j_2, m_1', m_2' | j_1, j_2, j, m\rangle$$

$$\times \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, j, m\rangle = \delta_{j'j}\delta_{m'm}$$

注意到(23)式及(25)式，上式变成

$$\sum_{m_1'm_2'}\sum_{m_1m_2}\langle j_1, j_2, m_1', m_2' | j_1, j_2, j', m'\rangle$$

$$\delta_{m_1'm_1}\delta_{m_2'm_2}\langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, j, m\rangle$$

$$= \delta_{j'j}\delta_{m'm}$$

从而得到

$$\sum_{m_1m_2}\langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, j', m'\rangle\langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, j, m\rangle$$

$$= \delta_{j'j}\delta_{m'm} \tag{28}$$

为了方便，规定

$$\langle j_1,j_2,j,m|j_1,j_2,m_1,m_2\rangle \equiv \langle j_1,j_2,m_1,m_2|j_1,j_2,j,m\rangle \quad (29)$$

它们表示同一矩阵元①，即表示(m_1,m_2)行(j,m)列元素，不是互为转置的元素. 这样，(28)式也可表为

$$\sum_{m_1m_2}\langle j_1,j_2,j',m'|j_1,j_2,m_1,m_2\rangle\langle j_1,j_2,m_1,m_2|j_1,j_2,j,m\rangle$$
$$= \delta_{j'j}\delta_{m'm} \quad (30)$$

利用这种正交关系，可以将变换式(13)式的逆变换表为

$$|j_1,j_2,m_1,m_2\rangle = \sum_{j,m}|j_1,j_2,j,m\rangle\langle j_1,j_2,j,m|j_1,j_2,m_1,m_2\rangle$$
$$= \sum_{j,m}|j_1,j_2,j,m\rangle\langle j_1,j_2,m_1,m_2|j_1,j_2,j,m\rangle \quad (31)$$

上式的正确性验证如下. 将上式两边乘以$\langle j_1,j_2,m_1,m_2|j_1,j_2,j',m'\rangle$并对$m_1,m_2$求和，

$$\text{左边} = \sum_{m_1m_2}|j_1,j_2,m_1,m_2\rangle\langle j_1,j_2,m_1,m_2|j_1,j_2,j',m'\rangle$$
$$= |j_1,j_2,j',m'\rangle$$
$$\text{右边} = \sum_{j,m}\sum_{m_1m_2}|j_1,j_2,j,m\rangle\langle j_1,j_2,m_1,m_2|j_1,j_2,j,m\rangle$$
$$\times\langle j_1,j_2,m_1,m_2|j_1,j_2,j',m'\rangle$$
$$= \sum_{j,m}|j_1,j_2,j,m\rangle\delta_{j'j}\delta_{m'm}$$
$$= |j_1,j_2,j',m'\rangle$$

下面我们来求 C. G. 系数的另一个正交关系. 为此，将(31)式代入(25)式，我们有

$$\sum_{j,m}\sum_{j',m'}\langle j_1,j_2,j',m'|j_1,j_2,m_1',m_2'\rangle^*\langle j_1,j_2,j',m'|j_1,j_2,j,m\rangle$$
$$\times\langle j_1,j_2,m_1,m_2|j_1,j_2,j,m\rangle = \delta_{m_1'm_1}\delta_{m_2'm_2}$$

注意到(24)式及(27)式，上式变成

$$\sum_{j',m'}\sum_{j,m}\langle j_1,j_2,j',m'|j_1,j_2,m_1',m_2'\rangle\delta_{j'j}\delta_{m'm}$$

① 参阅 A. W. Joshi, Elements of Group Theory for physicists, Second Edition, P. 203

$$\times \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, j, m \rangle = \delta_{m_1' m_1} \delta_{m_2' m_2}$$

从而得到

$$\sum_{j,m} \langle j_1, j_2, j, m | j_1, j_2, m_1', m_2' \rangle \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, j, m \rangle$$
$$= \delta_{m_1', m_1} \delta_{m_2', m_2} \tag{32}$$

注意到(29)式,上式亦可表为

$$\sum_{j,m} \langle j_1, j_2, m_1', m_2' \rangle \langle j_1, j_2, j, m \rangle \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, j, m \rangle$$
$$= \delta_{m_1' m_1} \delta_{m_2' m_2} \tag{33}$$

C. G. 系数的正交关系(28)式和(33)式也是 *C. G.* 系数的幺正性和实数性的反映.

4. *C. G.* 系数的计算

为了明显求得 *C. G.* 系数,我们首先要求得它们间的递推关系(recursion relations),根据此关系,各系数可由其中之一算出. 为此,我们将升算符 $J_+ = J_{1+} + J_{2+}$ 作用于(13)式的两边,利用 §2 (24)式可得

$$\sqrt{j(j+1) - m(m+1)} | j, m+1 \rangle$$
$$= \sum_{m_1, m_2} \{ \sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1+1)} | j_1, j_2, m_1+1, m_2 \rangle$$
$$+ \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2+1)} | j_1, j_2, m_1, m_2+1 \rangle \}$$
$$\times \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, j, m \rangle \tag{34}$$

现在,我们将上式右端第一项中求和变量改为 $m_1' = m_1 + 1$ 而保留 m_2 不变,在第二项中将求和变量改为 $m_2' = m_2 + 1$ 而保留 m_1 不变. 这时第一项成为

$$\sum_{m_1' = -j_1+1}^{j_1+1} \sum_{m_2 = -j_2}^{j_2} \sqrt{j_1(j_1+1) - (m_1' - 1) m_1'} | j_1, j_2, m_1', m_2 \rangle$$
$$\times \langle j_1, j_2, m_1' - 1, m_2 | j_1, j_2, j, m \rangle$$

由上式可看出,当 $m_1' = j_1 + 1$ 或 $-j_1$ 时,平方根等于零. 因此,m_1' 的求和范围可改为 $-j_1$ 至 j_1 而不影响求和的结果. 最后,将 m_1' 改写成 m_1,则上式成为

$$\sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \sqrt{j_1(j_1+1)-m_1(m_1-1)}\,|j_1,j_2,m_1,m_2\rangle$$

$$\times \langle j_1,j_2,m_1-1,m_2|j_1,j_2,j,m\rangle$$

(34)式中第二项可同样处理，得到

$$\sum_{m_1}\sum_{m_2}\sqrt{j_2(j_2+1)-m_2(m_2-1)}\,|j_1,j_2,m_1,m_2\rangle$$

$$\times \langle j_1,j_2,m_1,m_2-1|j_1,j_2,j,m\rangle$$

于是，(34)式变成

$$\begin{aligned}
&\sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\,|j,m+1\rangle \\
&=\sum_{m_1,m_2}\sqrt{j_1(j_1+1)-m_1(m_1-1)}\,|j_1,j_2,m_1,m_2\rangle \\
&\quad\times \langle j_1,j_2,m_1-1,m_2|j_1,j_2,j,m\rangle \\
&\quad+\sum_{m_1,m_2}\sqrt{j_2(j_2+1)-m_2(m_2-1)}\,|j_1,j_2,m_1,m_2\rangle \\
&\quad\times \langle j_1,j_2,m_1,m_2-1|j_1,j_2,j,m\rangle
\end{aligned}\tag{35}$$

用$|j_1,j_2,j',m'\rangle$右乘上式两端，并利用正交归一化条件(25)式，最后将$m_1'\to m_1, m_2'\to m_2$便得到

$$\begin{aligned}
&\sqrt{j(j+1)-m(m+1)}\langle j_1,j_2,m_1,m_2|j_1,j_2,j,m+1\rangle \\
&=\sqrt{j_1(j_1+1)-m_1(m_1-1)}\langle j_1,j_2,m_1-1,m_2|j_1,j_2,j,m\rangle \\
&\quad+\sqrt{j_2(j_2+1)-m_2(m_2-1)}\langle j_1,j_2,m_1,m_2-1|j_1,j_2,j,m\rangle
\end{aligned}\tag{36}$$

或
$$\begin{aligned}
&\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\langle j_1,j_2,m_1,m_2|j_1,j_2,j,m+1\rangle \\
&=\sqrt{(j_1+m_1)(j_1-m_1+1)}\langle j_1,j_2,m_1-1,m_2|j_1,j_2,j,m\rangle \\
&\quad+\sqrt{(j_2+m_2)(j_2-m_2+1)}\langle j_1,j_2,m_1,m_2-1|j_1,j_2,j,m\rangle
\end{aligned}\tag{37}$$

与此类似，用降算符$J_-=J_{1-}+J_{2-}$代替J_+作用于(13)式两端，并遵循与上述相同的步骤，我们得到另一个递推关系式：

$$\sqrt{j(j+1)-m(m-1)}\langle j_1,j_2,m_1,m_2|j_1,j_2,j,m-1\rangle$$

$$=\sqrt{j_1(j_1+1)-m_1(m_1+1)}\langle j_1,j_2,m_1+1,m_2|j_1,j_2,j,m\rangle$$
$$+\sqrt{j_2(j_2+1)-m_2(m_2+1)}\langle j_1,j_2,m_1,m_2+1|j_1,j_2,j,m\rangle \tag{38}$$

或 $$\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\langle j_1,j_2,m_1,m_2|j_1,j_2,j,m\rangle$$
$$=\sqrt{(j_1-m_1)(j_1+m_1+1)}\langle j_1,j_2,m_1+1,m_2|j_1,j_2,j,m\rangle$$
$$+\sqrt{(j_2-m_2)(j_2+m_2+1)}\langle j_1,j_2,m_1,m_2+1|j_1,j_2,j,m\rangle \tag{39}$$

利用 C. G. 系数的递推关系(36)式和(38)式，只要知道其中一个系数，就可推算出其余的系数. 例如，只要知道 $m=j_1+j_2$ 时的系数，就足以推算出所有的 C. G. 系数.

$m=j_1+j_2$ 的 C. G. 系数可用如下方法求得. $m=j_1+j_2$ 是 m 的最大值，仅当 j 也取其最大值 j_1+j_2 时才能出现这种情况，这时，$m=j=j_1+j_2$. 注意到选择定则 $|m|\leqslant j$ 及 $m=m_1+m_2$ 可以看出，(13)式中不为零的 C. G. 系数只有 $m_1=j_1$ 和 $m_2=j_2$ 的那一个. 因此，(13)式变成

$$|j_1,j_2,j_1+j_2,j_1+j_2\rangle$$
$$=|j_1,j_2,j_1,j_2\rangle\langle j_1,j_2,j_1,j_2|j_1,j_2,j_1+j_2,j_1+j_2\rangle \tag{40}$$

现在，因为态矢 $|j_1,j_2,j_1+j_2,j_1+j_2\rangle$ 和 $|j_1,j_2,j_1,j_2\rangle$ 都是归一化的，所以上式中 C. G. 系数只能是一个模为 1 的复数 $e^{i\delta}$. 一般选取 $\delta=0$，即取 C. G. 系数为实数. 于是得到

$$\langle j_1,j_2,j_1,j_2|j_1,j_2,j_1+j_2,j_1+j_2\rangle=e^{i\delta}=1 \tag{41}$$

或简写为

$$\langle j_1,j_2,j_1,j_2|j_1+j_2,j_1+j_2\rangle=1 \tag{42}$$

$$\langle m_1=j_1,m_2=j_2|j=j_1+j_2,m=j_1+j_2\rangle=1 \tag{43}$$

这就表明，当 $m=j=j_1+j_2$ 时出现 m 的最大值，而且在此情况下只存在一个等于 1 的 C. G. 系数.

下面我们讨论如何构造 C. G. 系数矩阵.

我们已经知道，线性独立的非耦合表象的基矢 $|j_1,j_2,m_1,m_2\rangle$ 有 $(2j_1+1)(2j_2+1)$ 个，它们构成 $(2j_1+1)(2j_2+1)$ 维子空间；线性

独立的耦合表象基矢$|j_1,j_2,j,m\rangle$也有$(2j_1+1)(2j_2+1)$个，构成同样维数的子空间. 因此，C. G. 系数$\langle j_1,j_2,m_1,m_2|j_1,j_2,j,m\rangle$矩阵也有$(2j_1+1)(2j_2+1)$行和列. 但我们将表明，此矩阵又可分为若干个子矩阵(submatrices)，即 C. G. 系数的$(2j_1+1)(2j_2+1)$维矩阵可约化为一些较小的矩阵的直和，每个容许值$m=m_1+m_2$对应于一个子矩阵，由(41)式可知，有一个$|X|$的子矩阵对应于m和j的最大值$m=j_1+j_2$和$j=j_1+j_2$.

m的下一个最大值是$m=j_1+j_2-1$. 由$|m|\leqslant j$可知这个m值属于$j=j_1+j_2$或$j=j_1+j_2-1$. 又由$m=m_1+m_2$可知，$m_1=j_1,m_2=j_1-1$，或$m_1=j_1-1,m_2=j_2$. 这表明，两个终态$|j_1+j_2,j_1+j_2-1\rangle$和$|j_1+j_2-1,j_1+j_2-1\rangle$都只是两个初态$|j_1,j_2,j_1,j_2-1\rangle$和$|j_1,j_2,j_1-1,j_2\rangle$的线性组合. 于是，(13)式变成

$$
\begin{aligned}
&|j_1+j_2,j_1+j_2-1\rangle \\
&=|j_1,j_2,j_1,j_2-1\rangle\langle j_1,j_2,j_1,j_2-1|j_1+j_2,j_1+j_2-1\rangle \\
&\quad+|j_1,j_2,j_1-1,j_2\rangle\langle j_1,j_2,j_1-1,j_2|j_1+j_2,j_1+j_2-1\rangle
\end{aligned}
\tag{44a}
$$

和

$$
\begin{aligned}
&|j_1+j_2-1,j_1+j_2-1\rangle \\
&=|j_1,j_2,j_1,j_2-1\rangle\langle j_1,j_2,j_1,j_2-1|j_1+j_2-1,j_1+j_2-1\rangle \\
&\quad+|j_1,j_2,j_1-1,j_2\rangle\langle j_1,j_2,j_1-1,j_2|j_1+j_2-1,j_1+j_2-1\rangle
\end{aligned}
\tag{44b}
$$

因此，在 C. G. 系数矩阵中，第二行和第三行以及第二列和第三列的元素中不为零的系数只有两个，构成2×2子矩阵.

利用递推关系(38)式可算出(44a)式中的 C. G. 系数. 令(38)式中$m_1=j_1,m_2=j_2-1,m=j=j_1+j_2$，则可求得

$$
\langle j_1,j_2,j_1,j_2-1|j_1+j_2,j_1+j_2-1\rangle=\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}
\tag{45}
$$

与此类似，若令(38)式中，$m_1=j_1-1,m_2=j_2,m=j=j_1+j_2$，则可求得

$$\langle j_1, j_2, j_1-1, j_2 | j_1+j_2, j_1+j_2-1\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}} \tag{46}$$

(45)和(46)式是 $j=j_1+j_2$ 和 $m=j_1+j_2-1$ 的两个 C. G. 系数. 还有两个 C. G. 系数是 $m=j_1+j_2-1$ 和 $j=j_1+j_2-1$ 的，它们可以利用正交关系(24)和(25)式算出.

为了阐明计算步骤，我们在表中列出所考虑的矩阵元，用 a 和 b 分别表示(45)式和(46)式的矩阵元.

表 1　C. G. 系数的计算

m_1	m_2 \ j, m	j_1+j_2	j_1+j_2	j_1+j_2-1	……	
j_1	j_2	1	0	0	0	…
j_1	j_2-1	0	a	c	0	…
j_1-1	j_2	0	b	d	0	…
⋮	⋮	0	0	0	⋱	
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮		⋱

表中，

$$a = \sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}} \tag{47}$$

$$b = \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}} \tag{48}$$

待求的矩阵元用 c 和 d 表示，则由 (j_1, j_2-1) 行的归一化条件给出 $a^2+c^2=1$，注意到(47)式，则得

$$c^2 = \frac{j_1}{j_1+j_2} \tag{49}$$

与此类似，由 (j_1-1, j_2) 行的归一化条件 $b^2+d^2=1$ 可求得

$$d^2 = \frac{j_2}{j_1+j_2} \tag{50}$$

所考虑的两列的正交性则要求 $ac+bd=0$，即 $c=-d\dfrac{b}{a}=-d$

$\sqrt{j_1/j_2}$. 这表明 c 和 d 都是实数且符号相反. 这里又有一个符号的任意选择问题，这是按照下述惯例确定的：这些元素中的第一个，也就是能让 $j=m, m_1=j_1$ 且一般形式为 $\langle j_1, j_2, j_1, j-j_1 | j, j\rangle$ 的那一个元素定义为正实数. 由此得出

$$c \equiv \langle j_1, j_2, j_1, j_2-1 | j_1+j_2-1, j_1+j_2-1\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}} \tag{51}$$

$$d \equiv \langle j_1, j_2, j_1-1, j_2 | j_1+j_2-1, j_1+j_2-1\rangle = -\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}} \tag{52}$$

现在我们再考虑 $m=j_1+j_2-2$ 的情况. 这个 m 值属于 $j=j_1+j_1, j_1+j_2-1, j_1+j_2-2$，且 $(m_1, m_2)=(j_1, j_2-2), (j_1-1, j_2-1), (j_1-2, j_2)$，因而给出 3×3 子矩阵. 将(45)，(46)，(51)和(52)诸式应用于(38)式可求得前两列($j=j_1+j_2$ 和 j_1+j_2-1). 利用行的正交归一性可求得最后一列($j=j_1+j_2-2=m$)，归一化过程又导致一个任意的符号，它是由下述惯例确定的：最后一列的第一个元素要为正实数.

重复上述步骤即可确定所求矩阵的其余子矩阵. 如果用 m 的降序标记列时，子矩阵的阶(rank)从 1 开始逐次增大 1，达到最高阶后，保持一个或多个同阶的子矩阵，然后阶数逐次减小 1，直至最后一个 $|X|$ 子矩阵(对应于 $m=-j_1-j_2, j=j_1+j_2, m_1=-j_1, m_2=-j_2$). $C.G.$ 矩阵将是分块对角形式的.

按上述方法，原则上可以把所有 $C.G.$ 系数求出，但这种作法是很繁的. 在实际上，我们有更方便的公式来计算它们，而平常使用它们时，有现成的表可查. 下面列出几个 $C.G.$ 系数表.

表 2 $C.G.$ 系数矩阵

(a) $=j_1=j_2=\frac{1}{2}$

m_1	m_2 \ j / m	$j=1$, $m=1$	$j=1$, $m=0$	$j=0$, $m=0$	$j=1$, $m=-1$
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1			0
$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$		$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	
$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$		$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$-\sqrt{\frac{1}{2}}$	
$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	0			1

(b) $j_1=1, j_2=\frac{1}{2}$

m_1	m_2 \ j / m	$j=\frac{3}{2}$, $m=\frac{3}{2}$	$j=\frac{3}{2}$, $m=\frac{1}{2}$	$j=\frac{1}{2}$, $m=\frac{1}{2}$	$j=\frac{3}{2}$, $m=-\frac{3}{2}$	$j=\frac{1}{2}$, $m=-\frac{1}{2}$	$j=\frac{3}{2}$, $m=-\frac{3}{2}$
1	$\frac{1}{2}$	1					
1	$-\frac{1}{2}$		$\sqrt{\frac{1}{3}}$	$\sqrt{\frac{2}{3}}$		0	
0	$\frac{1}{2}$		$\sqrt{\frac{2}{3}}$	$-\sqrt{\frac{1}{3}}$			
0	$-\frac{1}{2}$				$\sqrt{\frac{2}{3}}$	$\sqrt{\frac{1}{3}}$	
-1	$\frac{1}{2}$		0		$\sqrt{\frac{1}{3}}$	$-\sqrt{\frac{2}{3}}$	
-1	$-\frac{1}{2}$						1

(c) $j_1=j_2=1$

m_1 m_2 \ j / m	2 / 2	2 / 1	1 / 1	2 / 0	1 / 0	0 / 0	2 / −1	1 / −1	2 / −2
1 1	1								
1 0		$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$						
0 1		$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$-\sqrt{\frac{1}{2}}$						
1 −1				$\sqrt{\frac{1}{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$			
0 0				$\sqrt{\frac{2}{3}}$	0	$-\sqrt{\frac{1}{3}}$			
−1 1				$\sqrt{\frac{1}{6}}$	$-\sqrt{\frac{1}{2}}$	$\sqrt{\frac{1}{3}}$			
0 1							$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	
−1 0							$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$-\sqrt{\frac{1}{2}}$	
−1 −1									1

（矩阵中其余元素为 0）

[练习 1] 直接利用降算符 $J_-=J_{1-}+J_{2-}$ 求 $|j_1+j_2,j_1+j_2-1\rangle$ 的展开式，即求 C.G. 系数 $\langle j_1,j_2,j_1-1,j_2|j_1+j_2,j_1+j_2-1\rangle$ 和 $\langle j_1,j_2,j_1,j_2-1|j_1+j_2,j_1+j_2-1\rangle$，设已知 $\langle j_1,j_2,j_1,j_2|j_1+j_2,j_1+j_2\rangle=1$.

5. $j_2=\frac{1}{2}$，j_1 任意时 C.G. 系数的计算

作为例子，直接利用升、降算符的性质计算 $j_2=\frac{1}{2}$，j_1 任意时 C.G. 系数.

设 J^2 和 J_z 的本征方程为

$$\left.\begin{aligned} J^2|j_1,\frac{1}{2},\lambda,m\rangle &= \lambda\hbar^2|j_1,\frac{1}{2},\lambda,m\rangle \\ J_z|j_1,\frac{1}{2},\lambda,m\rangle &= m\hbar|j_1,\frac{1}{2},\lambda,m\rangle \end{aligned}\right\} \tag{53}$$

将 $|j_1,\frac{1}{2},\lambda,m\rangle$ 按 $|j_1,\frac{1}{2},m-m_2,m_2\rangle$ 展开

$$|j_1,\frac{1}{2},\lambda,m\rangle = \sum_{m_2}|j_1,\frac{1}{2},m-m_2,m_2\rangle \times \langle j_1,\frac{1}{2},m-m_2,m_2|j_1,\frac{1}{2},\lambda,m\rangle \tag{54}$$

为简洁起见,省略 j_1 和 $j_2=\frac{1}{2}$不写,上式成为

$$|\lambda,m\rangle = \sum_{m_2}|m-m_2,m_2\rangle\langle m-m_2,m_2||\lambda,m\rangle \tag{55}$$

由于 $j_2=\frac{1}{2}$,m_2 的可能值是 $m_2=\frac{1}{2},-\frac{1}{2}$. 于是,上式变成

$$\begin{aligned}|\lambda,m\rangle &= |m-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle\langle m-\frac{1}{2},\frac{1}{2}|\lambda,m\rangle \\ &\quad + |m+\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle\langle m+\frac{1}{2},-\frac{1}{2}|\lambda,m\rangle \\ &= c_{+1/2}|m-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle + c_{-1/2}|m+\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle\end{aligned} \tag{56}$$

式中

$$\begin{aligned}c_{+1/2} &\equiv \langle m-\frac{1}{2},\frac{1}{2}|\lambda,m\rangle \\ c_{-1/2} &\equiv \langle m+\frac{1}{2},-\frac{1}{2}|\lambda,m\rangle\end{aligned} \tag{57}$$

是待求的对应于 $m_2=\frac{1}{2}$和$-\frac{1}{2}$的 $C.G.$ 系数.

注意到

$$\begin{aligned}J^2 &= (J_1+J_2)^2 = J_1^2+J_2^2+2J_1\cdot J_2 \\ &= J_1^2+J_2^2+J_{1+}J_{2-}+J_{1-}J_{2+}+2J_{1z}J_{2z}\end{aligned} \tag{58}$$

将上式作用于(56)式,利用§2(24),(25)式及 $J_1^2,J_{1z},J_2^2,J_{2z}$的本征方程,便有

$$\begin{aligned}&J_{1+}J_{2-}|m-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle \\ &= J_{1+}|m-\frac{1}{2}\rangle J_{2-}|\frac{1}{2}\rangle \\ &= \sqrt{(j_1-m+\frac{1}{2})(j_1+m+\frac{1}{2})}\hbar|m+\frac{1}{2}\rangle\hbar|-\frac{1}{2}\rangle\end{aligned}$$

$$= \sqrt{(j_1 - m + \frac{1}{2})(j_1 + m + \frac{1}{2})\hbar^2}|m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$$

$$J_{1-}J_{2+}|m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$$

$$= \sqrt{(j_1 + m + \frac{1}{2})(j_1 - m + \frac{1}{2})\hbar^2}|m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$$

$$J_{1+}J_{2-}|m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = 0$$

$$J_{1-}J_{2+}|m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = 0$$

以及

$$J_{1z}J_{2z}|m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{2}(m - \frac{1}{2})\hbar^2|m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$$

$$J_{1z}J_{2z}|m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = -\frac{1}{2}(m + \frac{1}{2})\hbar^2|m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$$

$$J_1^2|m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = j_1(j_1 + 1)\hbar^2|m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$$

$$J_1^2|m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = j_1(j_1 + 1)\hbar^2|m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$$

$$J_2^2|m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$$

$$J_2^2|m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \frac{3}{4}\hbar^2|m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$$

于是，J^2 对(56)式作用的结果是

$$J^2|\lambda, m\rangle$$

$$= \{c_{+1/2}[j_1(j_1 + 1) + \frac{1}{4} + m]$$

$$+ c_{-1/2}\sqrt{(j_1 + m + \frac{1}{2})(j_1 - m + \frac{1}{2})}\}\hbar^2|m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$$

$$+ \{c_{-1/2}[j_1(j_1 + 1) + \frac{1}{4} - m]$$

$$+ c_{+1/2}\sqrt{(j_1 - m + \frac{1}{2})(j_1 + m + \frac{1}{2})}\}\hbar^2|m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$$

(59)

注意到(53)式第一式便得到

$$\begin{aligned}
&\lambda|\lambda, m\rangle \\
&= \Big\{c_{+1/2}[j_1(j_1 + 1) + \frac{1}{4} + m] \\
&\quad + c_{-1/2}\sqrt{(j_1 + m + \frac{1}{2})(j_1 - m + \frac{1}{2})}\Big\}|m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\
&\quad + \Big\{c_{-1/2}[j_1(j_1 + 1) + \frac{1}{4} - m] \\
&\quad + c_{+1/2}\sqrt{(j_1 - m + \frac{1}{2})(j_1 + m + \frac{1}{2})}\Big\}|m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle
\end{aligned} \tag{60}$$

用$\langle m-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}|$左乘上式并利用正交归一化条件,得

$$\begin{aligned}
&\lambda\langle m - \frac{1}{2}, \frac{1}{2}|\lambda, m\rangle \\
&= c_{1/2}[j_1(j_1 + 1) + \frac{1}{4} + m] \\
&\quad + c_{-1/2}\sqrt{(j_1 + m + \frac{1}{2})(j_1 - m + \frac{1}{2})}
\end{aligned}$$

由(57)式可知,$\langle m-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}|\lambda, m\rangle = c_{+1/2}$,于是上式成为

$$\begin{aligned}
&c_{+1/2}\Big\{\lambda - [j_1(j_1 + 1) + \frac{1}{4} + m]\Big\} \\
&\quad + c_{-1/2}\Big\{-\sqrt{(j_1 + m + \frac{1}{2})(j_1 - m + \frac{1}{2})}\Big\} = 0
\end{aligned} \tag{61}$$

用$\langle m+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}|$左乘(60)式并利用正交归一化条件得

$$\lambda\langle m + \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}|\lambda, m\rangle$$

$$=c_{-1/2}[j_1(j_1+1)+\frac{1}{4}-m]$$

$$+c_{+1/2}\sqrt{(j_1-m+\frac{1}{2})(j_1+m+\frac{1}{2})}$$

注意到(57)式，上式变成

$$c_{+1/2}\left\{-\sqrt{(j_1-m+\frac{1}{2})(j_1+m+\frac{1}{2})}\right\}$$

$$+c_{-1/2}\left\{\lambda-[j_1(j_1+1)+\frac{1}{4}-m]\right\}=0 \tag{62}$$

(60)式和(62)式是关于 $c_{+1/2}, c_{-1/2}$ 的齐次线性方程组，有非零解的条件是系数行列式等于零，即

$$\begin{vmatrix} \lambda-j_1(j_1+1)-\frac{1}{4}-m & \sqrt{(j_1+m+\frac{1}{2})(j_1-m+\frac{1}{2})} \\ -\sqrt{(j_1-m+\frac{1}{2})(j_1+m+\frac{1}{2})} & \lambda-j_1(j_1+1)-\frac{1}{4}+m \end{vmatrix}=0 \tag{63}$$

解之得 $$\lambda-j_1(j_1+1)-\frac{1}{4}=\pm(j_1+\frac{1}{2})$$

于是

$$\lambda_1=j_1(j_1+1)+\frac{1}{4}+j_1+\frac{1}{2}$$

$$=(j_1+\frac{1}{2})(j_1+\frac{3}{2})$$

$$=j(j+1),\quad j=j_1+\frac{1}{2} \tag{64}$$

$$\lambda_2=j_1(j_1+1)+\frac{1}{4}-j_1-\frac{1}{2}$$

$$=(j_1-\frac{1}{2})(j_1+\frac{1}{2})$$

$$=j(j+1),\quad j=j_1-\frac{1}{2} \tag{65}$$

这样，我们便求得了 J^2 的本征值为 $j(j+1)\hbar^2$，即(53)式第一式应改写成

$$\left.\begin{aligned} &J^2|j_1,\frac{1}{2},j,m\rangle = j(j+1)\hbar^2|j_1,\frac{1}{2},j,m\rangle \\ &j = \begin{cases} j_1+\frac{1}{2} \\ j_1-\frac{1}{2} \end{cases} \end{aligned}\right\} \tag{66}$$

现将 $\lambda=j(j+1)$代入(61)式得

$$c_{+1/2}[j(j+1)-j_1(j_1+1)-\frac{1}{4}-m]$$

$$+c_{-1/2}\left[-\sqrt{(j_1+m+\frac{1}{2})(j_1-m+\frac{1}{2})}\right]=0$$

由此得

$$c_{-1/2}=c_{+1/2}\frac{j(j+1)-j_1(j_1+1)-\frac{1}{4}-m}{\sqrt{(j_1+m+\frac{1}{2})(j_1-m+\frac{1}{2})}} \tag{67}$$

将 $\lambda=j(j+1)$代入(62)式则得

$$c_{+1/2}=c_{-1/2}\frac{j(j+1)-j_1(j_1+1)-\frac{1}{4}+m}{\sqrt{(j_1-m+\frac{1}{2})(j_1+m+\frac{1}{2})}} \tag{68}$$

为了确定 $c_{+1/2}$和 $c_{-1/2}$,还必须利用归一化条件:

$$|c_{+1/2}|^2+|c_{-1/2}|^2=1 \tag{69}$$

由(68)和(69)两式,(或(67)和(69)两式),可求 $c_{+1/2}$和 $c_{-1/2}$.为此,将(68)式平方代入(69)式得

$$|c_{-1/2}|^2\left\{\frac{[j(j+1)-j_1(j_1+1)-\frac{1}{4}+m]^2}{(j_1+m+\frac{1}{2})(j_1-m+\frac{1}{2})}+1\right\}=1$$

若选取 $c_{-1/2}$的相因子 $e^{i\alpha}$中的 $\alpha=0$,即取 $c_{-1/2}$为实数,则由上式可求得

$$c_{-1/2} =$$

$$= \frac{\sqrt{(j_1 + m + \frac{1}{2})(j_1 - m + \frac{1}{2})}}{\sqrt{(j_1 + m + \frac{1}{2})(j_1 - m + \frac{1}{2}) + [j(j+1) - j_1(j_1+1) - \frac{1}{4} + m]^2}} \tag{70}$$

代入(68)式得

$$c_{+1/2} =$$

$$= \frac{j(j+1) - j_1(j_1+1) - \frac{1}{4} + m}{\sqrt{(j_1 + m + \frac{1}{2})(j_1 - m + \frac{1}{2}) + [j(j+1) - j_1(j_1+1) - \frac{1}{4} + m]^2}} \tag{71}$$

当 $j=j_1+\frac{1}{2}$时，(70)，(71)两式中的

$$j(j+1) - j_1(j_1+1) - \frac{1}{4} + m = j_1 + m + \frac{1}{2}$$

于是，(70)，(71)两式变成

$$c_{+1/2} = \sqrt{\frac{j_1 + m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}} \tag{72}$$

$$c_{-1/2} = \sqrt{\frac{j_1 - m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}} \tag{73}$$

当 $j=j_1-\frac{1}{2}$时

$$j(j+1) - j_1(j_1+1) - \frac{1}{4} + m = -(j_1 - m + \frac{1}{2})$$

于是，(70)，(71)两式变成

$$c_{+1/2} = -\sqrt{\frac{j_1 - m + \frac{1}{2}}{2j_1 + 1}} \tag{74}$$

$$c_{-1/2}=\sqrt{\frac{j_1+m+\frac{1}{2}}{2j_1+1}} \tag{75}$$

现将所求得的 $C.G.$ 系数列表如下：

表 3 $\langle j_1,\frac{1}{2},m-m_2,m_2|j_1,\frac{1}{2},j,m\rangle$表

j \ m_2	$m_2=\frac{1}{2}$	$m_2=-\frac{1}{2}$
$j_1+\frac{1}{2}$	$\sqrt{\frac{j_1+m+\frac{1}{2}}{2j_1+1}}$	$\sqrt{\frac{j_1-m+\frac{1}{2}}{2j_1+1}}$
$j_1-\frac{1}{2}$	$-\sqrt{\frac{j_1-m+\frac{1}{2}}{2j_1+1}}$	$\sqrt{\frac{j_1+m+\frac{1}{2}}{2j_1+1}}$

使用上表时注意，如果是

$$|j,m\rangle=\sum_{m_2}|m-m_2,m_2\rangle\langle m-m_2,m_2|j,m\rangle$$

则用横行，对 m_2 求和；反之，如果是

$$|m-m_2,m_2\rangle=\sum_{j}|j,m\rangle\langle j,m|m-m_2,m_2\rangle$$

则用纵列，对 j 求和.

利用已经求得的 $C.G.$ 系数(72)—(75)诸式，代回(56)式，便得到总角动量的本征矢：

当 $j=j_1+\frac{1}{2}$时，

$$\left|j_1,\frac{1}{2},j_1+\frac{1}{2},m\right\rangle=\sqrt{\frac{j_1+m+\frac{1}{2}}{2j_1+1}}\left|j_1,\frac{1}{2},m-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle+\sqrt{\frac{j_1-m+\frac{1}{2}}{2j_1+1}}\left|j_1,\frac{1}{2},m+\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle \tag{76}$$

当 $j=j_1-\frac{1}{2}$时，

$$|j_1,\frac{1}{2},j_1-\frac{1}{2},m\rangle=-\sqrt{\frac{j_1-m+\frac{1}{2}}{2j_1+1}}|j_1,\frac{1}{2},m-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle+\sqrt{\frac{j_1+m+\frac{1}{2}}{2j_1+1}}|j_1,\frac{1}{2},m+\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle \tag{77}$$

［例 1］当 $j_1=1$ 时，

$$j=\begin{cases} j_1+\frac{1}{2}=\frac{3}{2}, & m=\frac{3}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2},-\frac{3}{2} \\ j_1-\frac{1}{2}=\frac{1}{2}, & m=\frac{1}{2},-\frac{1}{2} \end{cases}$$

由(76)，(77)式算出 C.G. 系数列表如下：

表 4　$j_1=1, j_2=\frac{1}{2}$ 的 C.G. 系数表

$\lvert j, m\rangle$ \ $\lvert m_1, m_2\rangle$	$\lvert 1,\frac{1}{2}\rangle$	$\lvert 1,-\frac{1}{2}\rangle$	$\lvert 0,\frac{1}{2}\rangle$	$\lvert 0,-\frac{1}{2}\rangle$	$\lvert -1,\frac{1}{2}\rangle$	$\lvert -1,-\frac{1}{2}\rangle$
$\lvert\frac{3}{2},\frac{3}{2}\rangle$	1					
$\lvert\frac{3}{2},\frac{1}{2}\rangle$		$\sqrt{\frac{1}{3}}$	$\sqrt{\frac{2}{3}}$			
$\lvert\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\rangle$				$\sqrt{\frac{2}{3}}$	$\sqrt{\frac{1}{3}}$	
$\lvert\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\rangle$						1
$\lvert\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle$		$\sqrt{\frac{2}{3}}$	$-\sqrt{\frac{1}{3}}$			
$\lvert\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle$				$\sqrt{\frac{1}{3}}$	$-\sqrt{\frac{2}{3}}$	

[例 2] 当 $j_1=\frac{1}{2}$时，

$$j=\begin{cases} j_1+\frac{1}{2}=1, & m=1,0,-1 \\ j_1-\frac{1}{2}=0, & m=0 \end{cases}$$

由(76)，(77)式算出 C. G. 系数列表如下：

表 5　$j_1=\frac{1}{2}, j_2=\frac{1}{2}$的 C. G. 系数表

$\lvert m_1\ m_2\rangle$ \ $\lvert j, m\rangle$	$\lvert\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle$	$\lvert\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle$	$\lvert-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle$	$\lvert-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle$
$\lvert 1,1\rangle$	1			
$\lvert 1,0\rangle$		$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$\sqrt{\frac{1}{2}}$	
$\lvert 1,-1\rangle$				1
$\lvert 0,0\rangle$		$\sqrt{\frac{1}{2}}$	$-\sqrt{\frac{1}{2}}$	

[练习 2] 利用升、降算符的性质和态矢的正交归一化条件，直接计算 $j_1=1, j_2=\frac{1}{2}$时的 C. G. 系数，并与表 3、表 4 比较.

第八章 散射理论

散射问题就是量子碰撞问题.散射理论是量子力学的基本理论.海森堡于 1943 年引入的 S-矩阵理论或形式散射理论(formal scattering theory),就是散射理论的核心.这个理论不但适用于弹性散射,也适用于非弹性散射;既适用于非相对论情况,也适用于相对论情况.散射问题的中心内容是计算散射粒子的跃迁几率和散射截面,从而与实验进行比较.散射实验是研究微观粒子运动规律、相互作用以及它们的内部结构的重要手段,在原子、原子核及基本粒子物理学的发展中起着重要的作用.

在一般的量子力学教材中,对势散射的分波法和玻恩近似法都有详尽的介绍,本章进一步介绍势散射的格林函数法,并把主要精力放在形式散射理论上.

§1 一般描述

在散射过程中,如果入射粒子(incident particle)和靶粒子(target particle)的内部态都未发生改变,因而入射粒子与靶粒子的相对运动能量没有改变,便称为弹性散射(elastic scattering or elastic collision),否则,就称为非弹性散射(inelastic scattering).

散射问题的理论计算,以使用质心坐标系为宜.当引入质心坐标系之后,便可以把两体问题简化为单体问题.如果入射粒子和靶粒子之间的作用力只与它们的相对距离有关,则相对运动部分就相当于一个"粒子"(它的折合质量为 $m=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}$)在中心力场中的运动,这样,碰撞问题就简化为一个粒子在中心力场中的散射问题,即所谓势散射问题.

在散射实验中,具有一定动量(能量)的粒子,沿确定方向射向靶粒子,由于受到靶的作用而发生偏转,然后射出.在初等量子力学中已经知道,如果入射粒子流强度为 N,则在单位时间内散射到(θ,φ)方位上立体角 $d\Omega=\sin\theta d\theta d\varphi$ 内的粒子数 dN 应为

$$dN = \sigma(\theta,\varphi)Nd\Omega \tag{1}$$

式中 $\sigma(\theta,\varphi)$是比例常数,与入射粒子的能量、散射中心的性质以及粒子出射方向(θ,φ)有关.在中心力场的情形下,则 σ 与 φ 无关,简记为 $\sigma(\theta)$.在实验上是测量$\frac{dN}{d\Omega}$,然后除以入射粒子流强度 N,从而求得

$$\sigma(\theta,\varphi) = \frac{dN/d\Omega}{N} \tag{2}$$

显然,$\sigma(\theta,\varphi)$具有面积的量纲,称为微分散射截面(differential scattering cross section).将(2)式对所有方向积分,得

$$\sigma = \int\sigma(\theta,\varphi)d\Omega = \int_0^\pi\int_0^{2\pi}\sigma(\theta,\varphi)\sin\theta d\theta d\varphi \tag{3}$$

σ 叫做总散射截面,σ 或者 $\sigma(\theta,\varphi)$是一切散射实验所测量的量,所以,关于散射问题的理论计算就是要求出这些截面,以便同实验比较.量子力学处理定态散射问题的任务是,已知入射粒子的动量和入射粒子与靶粒子间的相互作用情况下,求微分散射截面,即求在远离散射中心各处发现粒子的几率.

设散射中心对入射粒子的相互作用势能 $V(\boldsymbol{r})$与时间无关,则粒子运动的薛定谔方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\boldsymbol{r})\psi = E\psi \tag{4}$$

或

$$(\nabla^2 + k^2)\psi = U\psi \tag{5}$$

其中

$$\left.\begin{aligned} k^2 &= \frac{2mE}{\hbar^2} \\ U &= \frac{2mV}{\hbar^2} \end{aligned}\right\} \tag{6}$$

在解薛定谔方程时,应当加上与散射的物理现象相对应的边界条件.因为实验上观测被散射的粒子都是在远离散射中心处进

行，所以需要知道 $r\to\infty$ 时波函数 ψ 的渐近形式(asymptotic form). 它由两部分组成：一部分是描写已知动量的入射粒子的平面波，另一部分是具有相同动量但波幅随 (θ,φ) 不同而异的球面散射波，即

$$\psi \xrightarrow{r\to\infty} Ae^{ikz} + f(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r} \tag{7}$$

因为是弹性散射，所以波矢 k 数值不变.

散射问题的显著特点是，不需要解出完全的解 ψ，只需要知道其当 $r\to\infty$ 时的渐近形式，即只需知道(7)式中的 $f(\theta,\varphi)$. 初等量子力学中已经证明

$$\sigma(\theta,\varphi) = |f(\theta,\varphi)|^2 \tag{8}$$

$f(\theta,\varphi)$ 称为散射振幅(scattering amplitude).

由(8)式可见，求微分散射截面(或称角分布)，归结为求散射振幅，所以，散射问题的中心是计算散射振幅 $f(\theta,\varphi)$，而 $f(\theta,\varphi)$ 的具体形式是通过解薛定谔方程从 $r\to\infty$ 时 ψ 的渐近形式中得到.

在中心力场中，$f(\theta,\varphi)$ 与 φ 无关，简记为 $f(\theta)$.

§2 势散射的格林函数法·积分方程

1. 格林函数(Green's function)的一些简单知识

设有线性非齐次(inhomogeneous)方程

$$\hat{L}\psi(x) = \rho(x) \tag{1}$$

$\hat{L}$ 为线性算子，$\rho(x)$ 为已知函数. 这个方程的通解形式上可表为

$$\psi(x) = \psi_0(x) + \hat{L}^{-1}\rho(x) \tag{2}$$

其中 $\psi_0(x)$ 是齐次(homogeneous)方程

$$\hat{L}\psi_0(x) = 0 \tag{3}$$

的通解，$\hat{L}^{-1}\rho(x)$ 是方程(1)的任一特解，满足所给问题的边界条件. 现在我们来求此特解. 根据 δ 函数的性质，有

$$\rho(x)=\int\rho(x')\delta(x-x')dx' \tag{4}$$

于是
$$\hat{L}^{-1}\rho(x)=\int\rho(x')\hat{L}^{-1}\delta(x-x')dx'$$
$$=\int\rho(x)G(x-x')dx' \tag{5}$$

其中已设

$$G(x,x')=\hat{L}^{-1}\delta(x-x') \tag{6}$$

即
$$\hat{L}G(x,x')=\delta(x-x') \tag{7}$$

上式定义的 $G(x,x')$ 称为格林函数. 将(5)式代入(2)式，就可得到非齐次方程(1)式的通解：

$$\psi(x)=\psi_0(x)+\int\rho(x')G(x,x')dx' \tag{8}$$

由此可见，知道了 $G(x,x')$ 后，非齐次方程(1)式的通解就确定了，而求 $G(x,x')$ 要根据具体问题所给的边界条件. (6)式中的 δ 函数，常用 $\hat{L}$ 的一组正交完备本征函数来展开.

2. 定态势散射问题的格林函数解法

设入射粒子能量为 E，入射方向取为 z 轴，$k=\sqrt{2mE/\hbar^2}$ 为入射波波数，则由 § 1 知，弹性散射问题归结为在边界条件

$$\psi\xrightarrow{r\to\infty}Ae^{ikz}+f(\theta,\varphi)\frac{e^{ikr}}{r} \tag{9}$$

下求解薛定谔方程

$$(\nabla^2+k^2)\psi=U(\boldsymbol{r})\psi \tag{10}$$

式中 $U(\boldsymbol{r})=2mV(\boldsymbol{r})/\hbar^2$.

现在用格林函数法求解散射问题. 尽管(10)式左右边包含未知函数 ψ，我们还是把(10)式右边的 $U(\boldsymbol{r})\psi$ 暂时形式上看作是非齐次项，并把(10)式左边的算子 ∇^2+k^2 看作是(1)式中的 $\hat{L}$，则(10)式的特解可借助于格林函数 $G(x,x')$ 表示为

$$\psi'=\int G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')U(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}')d\boldsymbol{r}' \tag{11}$$

事实上，上式是满足薛定谔方程(10)式的，这只要将上式代入(10)式，并利用(7)式和 δ 函数的性质即可验证. (10)式对应的齐次方

程为

$$(\nabla^2 + k^2)\psi_0 = 0 \tag{12}$$

它是自由粒子(没有散射存在)的薛定谔方程,其解 ψ_0 为

$$\psi_0 = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{13}$$

将齐次方程(12)式的解(13)式与(10)式的特解(11)式相加,便得到非齐次方程(10)式的解:

$$\psi_k = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + \int G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')U(\boldsymbol{r}')\psi_k(\boldsymbol{r}')d\boldsymbol{r}' \tag{14}$$

($d\boldsymbol{r}$ 表示空间体积元),式中 k 具有确定的大小,由入射粒子的能量决定:$k=\sqrt{2mV(r)/\hbar^2}$,但方向不确定,因此有无穷大的方向上的简并度(degeneracy),在物理上对应于入射方向任意选择的可能性. 为确定起见,选择入射粒子运动方向为 z 轴,则(14)式变为

$$\psi_k = e^{ikz} + \int G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')U(\boldsymbol{r}')\psi_k(\boldsymbol{r}')d\boldsymbol{r}' \tag{15}$$

上式虽然满足薛定谔方程(10)式,但还没有满足边界条件(9)式,这是因为上式中的格林函数由(7)式定义,它有许多不同的解,只当解(7)式过程中让 $G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ 满足边界条件(9)式的要求时,(15)式才是既满足薛定谔方程(10)式,又满足边界条件(9)式的解.

现在我们来求 $G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ 的具体形式. 注意到 $\nabla^2+k^2\equiv\hat{L}$ 则由(7)式有

$$(\nabla^2 + k^2)G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \tag{16}$$

或由(6)式有

$$G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = (\nabla^2 + k^2)^{-1}\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \tag{17}$$

(16)式定义的 $G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ 称为薛定谔方程的格林函数. 为了求解 $G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$,首先用平面波来展开 δ 函数,即将 δ 函数写成傅立叶积分变换形式:

$$\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3}\int e^{i\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\mathrm{d}\boldsymbol{k}' \tag{18}$$

式中 $\mathrm{d}\boldsymbol{k}$ 表示 $\boldsymbol{k}$ 空间体积元. 由于

$$(\nabla^2 + k^2)e^{i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}} = (k^2 - k'^2)e^{i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}}$$

所以

$$(\nabla^2 + k^2)^{-1} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} = \frac{1}{(k^2 - k'^2)} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} \tag{19}$$

将(18)和(19)两式代入(17)式得

$$G_k(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3}(\nabla^2 + k^2)^{-1}\int e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}\mathrm{d}\mathbf{k}'$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3}\int \frac{e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{(k^2 - k'^2)}\mathrm{d}\mathbf{k}' \tag{20}$$

在 $\mathbf{k}'$ 空间中积分，选用球坐标是方便的. 以 $\mathbf{r}-\mathbf{r}'$ 为极轴，先对角度部分积分，利用

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} e^{ik'|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|\cos\theta}\sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\varphi$$

$$= \frac{2\pi}{ik'|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\left[e^{ik'|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} - e^{-ik'|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\right] \tag{21}$$

则得

$$G_k(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi^2 i|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\int_0^{\infty}\frac{k'\mathrm{d}k'}{(k^2 - k'^2)}\left[e^{ik'|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} - e^{-i|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\right]$$

$$= \frac{1}{4\pi^2 i|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{k'\mathrm{d}k'}{(k^2 - k'^2)}e^{ik'|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \tag{22}$$

$k' = \pm k$ 是被积函数的一阶极点. 我们把 k' 看成复变量，把(22)式的积分看成在 k' 的复平面上的积分，只要积分路线不经过奇点，$G_k(\mathbf{r},\mathbf{r}')$就是确定的函数. 为了满足边界条件(9)式的要求，必须适当选取积分回路(contour). 若选择如图 8-1 所示的积分回路，利用留数定理(residue theorem)计算积分：

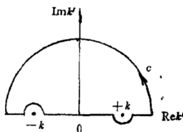


图 8-1

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{ik'|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{(k^2 - k'^2)}k'\mathrm{d}k' = \int_c \frac{e^{ik'|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{(k^2 - k'^2)}k'\mathrm{d}k'$$

$$= -\int_c \frac{e^{ik'|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{(k' - k)(k' + k)}k'\mathrm{d}k'$$

$$= -\frac{1}{2}\int_c \left[\frac{e^{ik'|r-r'|}}{(k'-k)} + \frac{e^{ik'|r-r'|}}{(k'+k)}\right] dk'$$

$$= -\frac{1}{2}\cdot 2\pi i e^{ik|r-r'|}$$

$$= -\pi i e^{ik|r-r'|}$$

代入(22)式得

$$G_k^{(+)}(r-r') = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|} \tag{23a}$$

若选取积分回路如图 8-2 所示，则有

$$G_k^{(-)}(r-r') = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{-ik|r-r'|}}{|r-r'|} \tag{23b}$$

若选取积分回路如图 8-3 所示，则得

$$G_k^{l}(r-r') = -\frac{1}{2\pi}\frac{\cos k|r-r'|}{|r-r'|} \tag{23c}$$

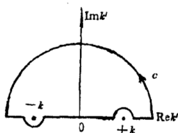


图 8-2

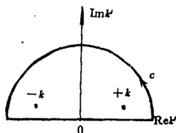


图 8-3

我们称 $G^{(+)}(r,r')$ 为出射波格林函数(outgoing wave Green's function)，而称 $G^{(-)}(r,r')$ 为入射波格林函数(incoming wave Green's function)，称 $G_k^{l}(r,r')$ 为驻波格林函数(standing wave Green's function).

从以上计算我们看到，不同积分回路的选择得到不同的格林函数，它们对应于不同的边界条件.

下面，我们证明 $G_k^{(+)}(r,r')$ 与边界条件(9)式相联系. 为此，将(23a)式代入(15)式，便得到薛定谔方程(10)式的解

$$\psi_k^{(+)} = e^{ikz} - \frac{1}{4\pi}\int \frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|} U(r')\psi_k^{(+)}(r')dr' \tag{24}$$

上式右边第一项显然与(9)式右边第一项相同，为了证明上式右边第二项当 $r\to\infty$ 时变成出射球面波 e^{ikr}/r 与某一角量振幅的乘积的形式，可将出现在指数中的 $|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|$ 按 r' 的幂展开：

$$
\begin{aligned}
|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'| &= \sqrt{r^2 - 2\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{r}' + r'^2} \\
&= r - \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r}' + \frac{1}{2r}(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{r}')^2 + \cdots
\end{aligned}
\tag{25}
$$

式中 $\boldsymbol{n}$ 是沿 $\boldsymbol{r}$ 方向的单位矢量. 注意到仅当 $r'<a$ 时，$U(\boldsymbol{r}')\neq 0$，其中 a 是势的有效范围，而当 $r\to\infty$ 时 $U(\boldsymbol{r}')$ 衰减比库仑场 $\frac{1}{r}$ 还要快，则对足够大的 r，有

$$
\frac{ka^2}{r} \ll 1 \tag{26}
$$

展式(25)中的平方项以后各项可以忽略，同时忽略(25)式右边第二项分母中的 r'，于是，我们得到该项在大 r 处的形式：

$$
-\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r}\int e^{-i\hat{\boldsymbol{k}}\cdot\boldsymbol{r}'}U(\boldsymbol{r}')\psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}'
$$

其中

$$
\hat{\boldsymbol{k}} = k\boldsymbol{n} \tag{27}
$$

是"末动量"矢量("final momentum" vector). 因此，(24)式的渐近形式就是

$$
\psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}(\boldsymbol{r}) \sim e^{ikz} - \frac{1}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r}\int e^{-i\hat{\boldsymbol{k}}\cdot\boldsymbol{r}'}U(\boldsymbol{r}')\psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}' \tag{28}
$$

由于 $\boldsymbol{n}$ 是沿 $\boldsymbol{r}$ 方向的单位矢量，所以 $\hat{\boldsymbol{k}}$ 只与 $\boldsymbol{r}$ 的方向有关，而与 r 的大小无关，从而(28)式的积分确实是角量振幅. 由此可见，作为(24)式的渐近形式的(28)式确实与边界条件(9)式具有相同的形式.

这样一来，我们就证明了(24)式既满足薛定谔方程(10)式，又满足渐近边界条件(9)式. 事实上，(24)式是一个积分方程(integral equation). 所以，我们建立起来的积分方程(24)式是与散射的薛定谔方程(10)式等价的，边界条件(9)式已包含其中. 可见，格林函数法的实质是把散射的薛定谔偏微分方程连同边界条件转化为积分方程. 我们把(24)式表示的解 $\psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}$ 称为散射问题的出射解

(outgoing solution). 类似地，与 $G_k^{(-)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ 相联系的解 $\psi_k^{(-)}$ 则称为入射解(incoming solution)，它没有直接的物理意义，但在形式散射理论的讨论中起重要作用.

对比(28)式和(9)式，便可得到散射振幅 $f(\theta,\varphi)$

$$f(\theta,\varphi) = -\frac{1}{4\pi}\int e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'}U(\boldsymbol{r}')\psi_k^{(+)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}' \tag{29}$$

当然，上式只是 f 借助于 $\psi_k^{(+)}$ 的隐表示式(implicit expression).

以上讨论是在坐标表象中进行的. 我们可以把(29)式写成标积的形式：

$$f(\theta,\varphi) = -\frac{1}{4\pi}(e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}'}, U\psi_k^{(+)}(\boldsymbol{r}')) \tag{30}$$

用更一般的记号，我们可以把 f 表为势的矩阵元

$$f(\theta,\varphi) = -\frac{1}{4\pi}\langle\varphi_k|U|\psi_k^{(+)}\rangle \tag{31}$$

其中，φ_k 表示薛定谔方程的自由平面波解，相应于动量大小为 k，方向沿探测器(detector)方向(即 $\boldsymbol{r}$ 方向)运动的粒子；而 $\psi_k^{(+)}$ 则是散射问题的真实解，相应于在散射势作用下渐近行为是出射球面波的粒子. 换句话说，散射振幅就是整个体系的真实散射态 $\psi_k^{(+)}$ 与散射后某一特定的自由末态之间散射势的矩阵元.

3. 玻恩近似(the Born approximation)

众所周知，处理积分方程的方法是逐步求近法(successive approximation). 在零级近似中，我们忽略(28)式中的积分项，把(28)式第一项 e^{ikz} 作为零级近似解 $\psi_k^{(+)^{(0)}}(\boldsymbol{r})$：

$$\psi_k^{(+)(0)}(\boldsymbol{r}) = e^{ikz} \tag{32}$$

将上式代入(28)式来计算一级近似 $\psi_k^{(+)^{(1)}}(\boldsymbol{r})$：

$$\psi_k^{(+)(1)}(\boldsymbol{r}) = e^{ikz} - \frac{1}{4\pi}\int\frac{\exp(ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}U(\boldsymbol{r}')e^{ikz'}\mathrm{d}\boldsymbol{r}' \tag{33}$$

又把上式代入(28)式计算二级近似 $\psi_k^{(+)^{(2)}}(\boldsymbol{r})$，如此继续下去，可得 n 级近似 $\psi_k^{(+)^{(n)}}(\boldsymbol{r})$为

$$\psi_k^{(+)(n)}(\boldsymbol{r}) = e^{ikz} - \frac{1}{4\pi}\int\frac{\exp(ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|)}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}U(\boldsymbol{r}')\psi_k^{(+)^{(n-1)}}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}' \tag{34}$$

如果将零级近似(32)式代入(29)式，则得散射振幅的一级近似，称为一级玻恩近似：

$$f(\theta,\varphi)=-\frac{1}{4\pi}\int e^{-i\hat{k}\cdot r'}U(r')e^{ikz'}\mathrm{d}r' \tag{35}$$

对入射自由粒子的动量，引进记号 k_0 是有用的：

$$k_0=(0,0,k) \tag{36}$$

这样便有

$$k_0\cdot r'=kz'. \tag{37}$$

于是(35)式可写成

$$\begin{aligned}f(\theta,\varphi)&=-\frac{1}{4\pi}\int e^{-i\hat{k}\cdot r'}U(r')e^{ik_0\cdot r'}\mathrm{d}r'\\&=-\frac{1}{4\pi}\int \exp[i(k_0-\hat{k})\cdot r']U(r')\mathrm{d}r'\end{aligned} \tag{38}$$

可见在这一近似中，散射振幅 $f(\theta,\varphi)$本质上是散射势在自由入射平面波 $\exp(ik_0\cdot r)$与自由出射平面波 $\exp(i\hat{k}\cdot r)$之间的矩阵元，而 U 则可看作是引起初、末平面波态之间跃迁的微扰，此初、末态具有相等的能量，但不同的动量方向(能量守恒，动量不守恒).

现引进动量迁移矢量(momentum transfer vector)

$$K=k_0-\hat{k} \tag{39}$$

注意到 k_0 指向 z 轴，$\hat{k}$ 指向 r 方向，它们之间的夹角就是极角 θ(图 8-4)，又注意到弹性散射 $|\hat{k}|=|k_0|=k$，则

$$\begin{aligned}K^2&=\hat{k}^2-2k_0\cdot\hat{k}+k_0^2\\&=2k^2(1-\cos\theta)\end{aligned}$$

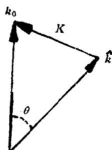


图 8-4

即

$$K=2k\sin\frac{\theta}{2} \tag{40}$$

利用(39)式，可将(38)式表为

$$f(\theta,\varphi)=-\frac{1}{4\pi}\int \exp(iK\cdot r')U(r')\mathrm{d}r' \tag{41}$$

上式的含义是：散射振幅是势 $U(r)$的傅立叶变换，即

$$U(\mathrm{K}) = \int e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) \mathrm{d}\mathbf{r}$$

所以
$$f(\theta,\varphi) = -\frac{1}{4\pi} U(\boldsymbol{K}) = -\frac{1}{4\pi} U(\boldsymbol{k}_0 - \hat{\boldsymbol{k}}) \tag{42}$$

要找到逐步求近法收敛的判据(criterion)是不容易的，即使是估计一级玻恩近似的准确程度亦是如此，我们只把结果写在下面：

$$\frac{V_0 a}{\hbar v} \ll 1 \tag{43}$$

其中 a 是散射势作用范围，V_0 是势的平均强度，v 是入射粒子速度. 一般说来，当入射粒子能量很高，而相互作用较小(可视为微扰)时，便可应用一级玻恩近似；或者说，玻恩近似适用于处理高能散射问题.

对于中心势场 $V(\boldsymbol{r}) = V(r)$，即势只与距离 r 有关而与方向无关的情形，玻恩近似(41)式可大大简化. 这是因为(41)式可对角量部分先进行积分从而得到简化. 为此目的，选用球坐标系，并取 $\boldsymbol{K}$ 的方向为极轴，使得

$$e^{i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}'} = e^{iKr'\cos\theta}$$

$$\mathrm{d}\boldsymbol{r}' = r'^2 \sin\theta \mathrm{d}r' \mathrm{d}\theta \mathrm{d}\varphi$$

代入(41)式对角量部分进行积分后得

$$\begin{aligned} f(\theta,\varphi) &= -\frac{1}{4\pi}\int_0^\infty U(r') r'^2 \mathrm{d}r' \int_0^{2\pi}\int_0^\pi e^{iKr'\cos\theta} \sin\theta \mathrm{d}\theta \mathrm{d}\varphi \\ &= -\frac{1}{4\pi}\int_0^\infty U(r') r'^2 \frac{2\pi}{iKr'} [e^{iKr'} - e^{-iKr'}] \mathrm{d}r' \\ &= -\frac{1}{K}\int_0^\infty r' U(r') \sin Kr' \mathrm{d}r' \end{aligned} \tag{44}$$

由上式可见，散射振幅与 r 无关，只是 θ 和 φ 的函数. 事实上，由于 $V(r)$ 具有球形对称性和入射粒子具有确定的方向(取为 z 轴)，所以，散射振幅具有柱对称性(cylindrical symmetry)，即 f 仅与 θ 有关((44)式中 K 与 θ 有关)，而与 φ 无关. 这是中心散射势必然的结果.

现在我们来讨论，在中心散射势情形下，应用玻恩近似的条

件. 假定势是足够平滑的短程势,则对散射振幅(29)式的主要贡献来自原点附近的范围. 这样,我们便可令 $r\simeq 0$ 来计算一级玻恩近似解(33)式中的积分. 对角量部分进行积分(注意 $z'=r'\cos\theta$)后(33)式成为

$$\psi_k^{(+)^{(1)}}=e^{ikz}-\int_0^\infty\frac{1}{k}e^{ikr'}U(r')\sin kr'\mathrm{d}r' \qquad (45)$$

如果

$$\frac{1}{k}\left|\int_0^\infty e^{ikr'}U(r')\sin kr'\mathrm{d}r'\right|\ll 1 \qquad (46)$$

则(45)式中第二项(散射波)同第一项比较可以忽略. 因为在计算一级 Born 近似时是以 e^{ikz}作为零级近似 $\psi_k^{(+)^{(0)}}(r)$,即忽略了 $\psi_k^{(+)}(r)$中第二项,所以(46)式就是应用一级玻恩近似的条件. 如果这个条件被满足,就可以用(38)式来代替(29)式,而(29)式正是一级玻恩近似下的散射振幅.

将 $k=\frac{p_0}{\hbar}=\frac{mv}{\hbar},U=\frac{2m}{\hbar^2}V$ 代 入(46)式得

$$\frac{1}{v\hbar}\left|\int_0^\infty 2\sin kr'e^{ikr'}V(r')\mathrm{d}r'\right|=\frac{1}{v\hbar}\left|i\int_0^\infty V(r')[1-e^{2ikr'}]\mathrm{d}r'\right|$$

$$\leqslant\frac{1}{v\hbar}\left|i\int_0^\infty V(r')\mathrm{d}r'\right|=\frac{V_0a}{v\hbar}\ll 1$$

这就是在中心势场中,一级玻恩近似适用的条件,与(43)式相同. 上式中 v 为入射粒子速度,a 为有效力程,$V_0=\frac{1}{a}\int V(r')\mathrm{d}r'$是势 $V(r)$的平均强度.

4. 相移(phase shifts)的近似计算公式

利用展开公式(注意 $K=2k\sin\frac{\theta}{2}$)

$$\frac{\sin Kr}{Kr}=\sum_{l=0}^\infty(2l+1)j_l^2(kr)P_l(\cos\theta) \qquad (47)$$

式中 $j_l(kr)$是球贝塞尔函数(spherical Bessel function),$P_l(\cos\theta)$是勒让得多项式(Legendre polynomials). 将上式代入(44)式,得

$$f(\theta)=-\sum_{l=0}^\infty(2l+1)P_l(\cos\theta)\int_0^\infty r'^2U(r')j_l^2(kr')\mathrm{d}r'$$

$$= -\frac{2m}{\hbar^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)\int_0^{\infty}V(r')j_l^2(kr')r'^2\mathrm{d}r' \tag{48}$$

与初等量子力学中分波法(partial wave)计算公式

$$f(\theta) = \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\delta_l}\sin\delta_l P_l(\cos\theta) \tag{49}$$

比较，当 δ_l 很小时，$e^{i\delta_l}\sim 1$，$\sin\delta_l\sim\delta_l$，可得到

$$\delta_l \simeq -\frac{2mk}{\hbar^2}\int_0^{\infty}V(r')j_l^2(kr')r'^2\mathrm{d}r' \tag{50}$$

可见，
$$\delta_l = \begin{cases} +, & \text{当 } V(r)<0 \quad (\text{引力}) \\ -, & \text{当 } V(r)>0 \quad (\text{斥力}) \end{cases} \tag{51}$$

设 $V(r)$ 只在 $r\leqslant r_0$ 范围内不显著为零，并且入射粒子能量较低，$kr_0\ll 1$，并利用

$$j_l(kr) \xrightarrow{kr\to 0} \frac{k^l r^l}{(2l+1)!!}$$

于是
$$\delta_l \simeq -\frac{2mk}{\hbar^2}\int_0^{r_0}V(r')\frac{k^{2l}r'^{2l}}{[(2l+1)!!]^2}\mathrm{d}r' \propto k^{2l+1} \tag{52}$$

随 l 增加，δ_l 下降很快，所以通常只需计算 l 较小的少数几个分波即可. 特别是能量很低时，只需考虑 s 分波.

§3 李普曼-许温格方程

前面我们在坐标表象中讨论了势散射问题，所得结果只局限于靶粒子对入射粒子间的相互作用能用一已知的势函数表示的情形. 有些问题(如基本粒子间的相互作用)，不一定能用定域的势函数(local potential function)来表征粒子间的相互作用. 因此，有必要建立散射的普遍理论，即所谓形式散射理论. 这一理论，在数学上很简练，在应用上更普遍，而且有可能应用对称性理论推得某些重要的结论.

本节从定态散射的薛定谔方程出发建立散射的普遍理论，引入李普曼-许温格方程.

1. 李普曼-许温格方程

让我们考虑一个量子体系(如散射、衰变等),它的哈密顿量 H 与时间无关. 为了暂时的方便,我们假定 H 可分为相加的两项:

$$H = H_0 + H' \tag{1}$$

其中 H_0的本征值和本征矢是已知的,即

$$H_0|\Phi_a\rangle = E_a|\Phi_a\rangle \tag{2}$$

在许多问题中,可以把 H_0看作体系的自由哈密顿量. 我们把具有能量本征值 E_a 和相应本征态矢 $|\Phi_a\rangle$的辅助体系称为参考体系(reference system). (1)式中 $H'\equiv V$ 代表引起散射的相互作用,称为引起参考体系微扰(perturbation)的相互作用哈密顿量(interaction Hamiltonian),而同时把参考体系称为未受微扰的体系(unperturbed system). 必须指出,将 H 分为 H_0和 H'不是必须的,有时甚至是不可能的.

现在我们的问题是要找寻定态方程

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \tag{3}$$

的解. 我们假定,能量的连续谱区域不因 V 的引入而受影响,即对每一 H_0的本征态 $|\Phi_a\rangle$,总有与之对应的 H 的本征态 $|\Psi_a\rangle$存在,它们具有共同的本征值 E_a,于是便有

$$H|\Psi_a\rangle = E_a|\Psi_a\rangle \tag{4}$$

现在我们要求解上式,也就是找出 $|\Psi_a\rangle$与 $|\Phi_a\rangle$的关系. 为此,我们形式上引进逆算符(inverse operator) $(E_a-H_0)^{-1}$,并写下(4)式的形式"解":

$$\begin{aligned}|\Psi_a\rangle &= |\Phi_a\rangle + (E_a - H_0)^{-1}H'|\Psi_a\rangle \\ &= |\Phi_a\rangle + \frac{1}{(E_a - H_0)}H'|\Psi_a\rangle\end{aligned} \tag{5}$$

将上式两边用算符 (E_a-H_0)作用,并注意到(1)式和(2)式,便可验证(5)式中的 $|\Psi_a\rangle$满足薛定谔方程(4)式. 事实上,

$$\begin{aligned}&(E_a - H_0)|\Psi_a\rangle \\ &= (E_a - H_0)|\Psi_a\rangle + (E_a - H_0)(E_a - H_0)^{-1}H'|\Psi_a\rangle \\ &= H'|\Psi_a\rangle\end{aligned}$$

移项得

$$(H_0 + H')|\Psi_a\rangle = E_a|\Psi_a\rangle$$

即 $$H|\Psi_a\rangle = E_a|\Psi_a\rangle$$

为了避免在奇点处的不确定，我们用

$$(E_a - H_0 + i\eta)^{-1} \quad 和 \quad (E_a - H_0 - i\eta)^{-1} \tag{6}$$

代替$(E_a-H_0)^{-1}$，其中 η 是任意正实数，在作完一切计算后再令 $\eta \to +0$. (6)式表示的新算符是有定义的，首先看它们作用到参考体系的任意本征态$|\Phi_n\rangle$上的效果. 注意到(2)式得

$$(E_a - H_0 \pm i\eta)|\Phi_n\rangle = (E_a - E_n \pm i\eta)|\Phi_n\rangle$$

用逆算符(6)式作用到上式两边，得

$$|\Phi_n\rangle = (E_a - E_n \pm i\eta)(E_a - H_0 \pm i\eta)^{-1}|\Phi_n\rangle$$

或

$$\frac{1}{(E_a - H_0 \pm i\eta)}|\Phi_n\rangle = \frac{1}{(E_a - E_n \pm i\eta)}|\Phi_n\rangle \tag{7}$$

可见，$(E_a-H_0\pm i\eta)^{-1}$作用到$|\Phi_n\rangle$上的结果是用本征值 E_n 代替 H_0，而且 H_0的本征矢$|\Phi_n\rangle$也是$(E_a-H_0\pm i\eta)^{-1}$属于本征值为$(E_0-E_n\pm i\eta)$的本征矢. 由(7)式又可看到，若不利用 $i\eta$ 项，则当 $E_a=E_n$ 时算符$(E_0-H_0\pm i\eta)^{-1}$变成奇异的.

用(6)式代替(5)式中的$(E_a-H_0)^{-1}$，则(5)式变成

$$|\Psi_a^{\pm}\rangle = |\Phi_a\rangle + \lim_{\eta\to+0}\frac{1}{(E_a - H_0 \pm i\eta)}H'|\Psi_a^{\pm}\rangle \tag{8}$$

其中，$|\Psi_a^+\rangle$代表 $i\eta$ 前取“+”号，$|\Psi_a^-\rangle$代表 $i\eta$ 前取“－”号. 上式是薛定谔方程(4)式的形式解(formal solution)，称为李普曼-许温格(Lippmann-Schwinger)方程. 它是散理论的基本方程，对任何表象都适用. 当取某一表象时，它就变成与定态薛定谔方程(3)式等价的弗雷德霍姆(Fredholm)型积分方程.

2. 势散射

现在我们来证明，在势散射的情形下，李普曼-许温格方程(8)式取坐标表象，便可得到 § 2的积分方程(24)式.

在势散射下，

$$\left.\begin{aligned} H_0 &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \\ H' &= V(r) \\ E_k &= \frac{\hbar^2}{2m}k^2 \end{aligned}\right\} \tag{9}$$

在坐标表象中，逆算符$(E_k-H_0\pm i\eta)^{-1}$的矩阵元是(利用完全性关系$\sum_{k'}|\Phi_{k'}\rangle\langle\Phi_{k'}|=1$)

$$\begin{aligned}
&\langle \boldsymbol{r}|\frac{1}{(E_k-H_0\pm i\eta)}|\boldsymbol{r}'\rangle \\
&=\sum_{k'}\langle \boldsymbol{r}|\frac{1}{(E_k-H_0\pm i\eta)}|\Phi_{k'}\rangle\langle\Phi_{k'}|\boldsymbol{r}'\rangle \\
&=\sum_{k'}\frac{1}{(E_k-E_{k'}\pm i\eta)}\langle \boldsymbol{r}|\Phi_{k'}\rangle\langle\Phi_{k'}|\boldsymbol{r}'\rangle \\
&=\sum_{k'}\frac{1}{(E_k-E_{k'}\pm i\eta)}\langle \boldsymbol{r}|\Phi_{k'}\rangle\langle \boldsymbol{r}'|\Phi_{k'}\rangle^* \qquad (10)
\end{aligned}$$

注意到
$$\langle \boldsymbol{r}|\Phi_{k'}\rangle=e^{i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}} \qquad (11)$$
是坐标表象中动量为$\hbar \boldsymbol{k}'$的平面波函数，并且由于$\boldsymbol{k}'$具有连续谱，求和可改为积分：

$$\sum_{k'}\rightarrow\frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}\boldsymbol{k}' \qquad (12)$$

即积分$\int e^{i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}\boldsymbol{k}'$归一化为$(2\pi)^3\delta(\boldsymbol{r})$，而不是$\delta(\boldsymbol{r})$. 再注意到$E_k=\frac{\hbar^2}{2m}k^2$，并令

$$\frac{2m}{\hbar^2}\eta=\varepsilon \qquad (13)$$

于是，(10)式变成

$$\begin{aligned}
&\langle \boldsymbol{r}|\frac{1}{(E_k-H_0\pm i\eta)}|\boldsymbol{r}'\rangle \\
&=\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{(2\pi)^3}\int\frac{e^{i\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}}{k^2-k'^2\pm i\varepsilon}\mathrm{d}\boldsymbol{k}' \\
&=\frac{2m}{\hbar^2}G_k(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') \qquad (14)
\end{aligned}$$

式中$G_k(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$是§2(20)式定义的格林函数. 可见，逆算符$(E_k-H_0\pm i\eta)^{-1}$的坐标表象就是格林函数(相差一常数因子$\frac{2m}{\hbar^2}$)，因此，逆算符$(E_k-H_0\pm i\eta)^{-1}\equiv G_0^{(\pm)}(E_k)$又称为格林算符.

现取(8)式中的"+"号，(省略$\lim\limits_{\eta\to+0}$符号不写)，即

$$|\Psi_k^+\rangle = |\Phi_k\rangle + \frac{1}{(E_k - H_0 + i\eta)} H' |\Psi_k^+\rangle \tag{15}$$

利用完全性关系 $\sum_{k'} |\Phi_{k'}\rangle\langle\Phi_{k'}| = 1$，则上式表为

$$\begin{aligned}|\Psi_k^+\rangle &= |\Phi_k\rangle + \sum_{k'} \frac{1}{(E_k - H_0 + i\eta)} |\Phi_{k'}\rangle\langle\Phi_{k'}| H' |\Psi_k^+\rangle \\ &= |\Phi_k\rangle + \sum_{k'} |\Phi_{k'}\rangle \frac{1}{(E_k - E_{k'} + i\eta)} \langle\Phi_{k'}| H' |\Psi_k^+\rangle \end{aligned} \tag{16}$$

其中利用了(7)式. 对于势散射，$H' = V(r)$，且

$$\langle r''|V(r)|r'\rangle = V(r'')\delta(r' - r'') \tag{17}$$

利用完全性关系 $\int |r\rangle\langle r| \mathrm{d}r = 1$，则(16)式中的 H' 矩阵元可表为

$$\begin{aligned}\langle\Phi_{k'}|H'|\Psi_k^+\rangle &= \langle\Phi_{k'}|V(r)|\Psi_k^+\rangle \\ &= \iint \langle\Phi_{k'}|r''\rangle\langle r''|V(r)|r'\rangle\langle r'|\Psi_k^+\rangle \mathrm{d}r'\mathrm{d}r'' \\ &= \iint \langle\Phi_{k'}|r''\rangle V(r'')\delta(r' - r'')\langle r'|\Psi_k^+\rangle \mathrm{d}r'\mathrm{d}r'' \\ &= \int \langle\Phi_{k'}|r'\rangle V(r')\langle r'|\Psi_k^+\rangle \mathrm{d}r' \\ &= \int e^{-ik'\cdot r'} V(r')\Psi_k^+(r')\mathrm{d}r' \end{aligned} \tag{18}$$

式中利用了

$$\left.\begin{aligned}\langle r|\Phi_k\rangle &= e^{ik\cdot r} \\ \langle\Phi_k|r\rangle &= \langle r|\Phi_k\rangle^* = e^{-ik\cdot r} \\ \langle r|\Psi_k^+\rangle &= \Psi_k^+(r)\end{aligned}\right\} \tag{19}$$

$\Psi_k^+(r)$ 是 $|\Psi_k^+\rangle$ 在坐标表象中的波函数.

取(16)式的坐标表象

$$\begin{aligned}&\langle r|\Psi_k^+\rangle \\ &= \langle r|\Phi_k\rangle + \sum_{k'} \langle r|\Phi_{k'}\rangle \frac{1}{(E_k - E_{k'} + i\eta)} \langle\Phi_{k'}|H'|\Psi_k^+\rangle\end{aligned} \tag{20}$$

将(18)式代入上式得

$$\langle \boldsymbol{r}|\Psi_k^+\rangle$$
$$=\langle \boldsymbol{r}|\Phi_k\rangle+\sum_{k'}\langle \boldsymbol{r}|\Phi_{k'}\rangle\frac{1}{(E_k-E_{k'}+i\eta)}\int e^{-i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}'}V(\boldsymbol{r}')\Psi_k^+(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}'$$

注意(12)式、(13)式及(19)式，上式变成

$$\begin{aligned}\Psi_k^+(\boldsymbol{r})&=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}+\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{(2\pi)^3}\iint\frac{e^{-i\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}}{k^2-k'^2+i\varepsilon}V(\boldsymbol{r}')\Psi_k^+(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{k}'\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\\&=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}+\frac{2m}{\hbar^2}\int G_k(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')V(\boldsymbol{r}')\Psi_k^+(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\\&=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}+\int G_k(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')U(\boldsymbol{r}')\Psi_k^+(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\end{aligned}\tag{21}$$

其中 $G_k(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$是 §2(20)式. (21)式与 §2(15)式形式相同，可见(21)式就是势散射的积分方程. 在对 $G_k(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$进行积分后，便得到 §2(23a)式，即

$$G_k^{(+)}(\boldsymbol{r})=-\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}$$

这时，(21)式变成

$$\Psi_k^+(\boldsymbol{r})=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}-\frac{1}{4\pi}\int\frac{e^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}U(\boldsymbol{r}')\Psi_k^+(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}\boldsymbol{r}'\tag{22}$$

上式就是 §2(24)式. 可见，在势散射情形下，李普曼-许温格方程取坐标表象就得到势散射的积分方程.

3. 李普曼-许温格方程的"闭合"形式解

现在寻找李普曼-许温格方程(8)式的形式解. 对$|\Psi_a^+\rangle$，用 H' 左乘(8)式并整理，得

$$H'|\Psi_a^+\rangle-H'\frac{1}{E_a-H_0+i\eta}H'|\Psi_a^+\rangle=H'|\Phi_a\rangle\tag{23}$$

式中我们省略了符号$\lim\limits_{\eta\to+0}$，下面凡是出现 η 的式子中，都应该在最后的结果中加上$\lim\limits_{\eta\to+0}$的记号. 将上式再代入(8)式右边第二项，得到

$$\begin{aligned}|\Psi_a^+\rangle=|\Phi_a\rangle&+\frac{1}{E_a-H_0+i\eta}H'|\Phi_a\rangle\\&+\frac{1}{E_a-H_0+i\eta}H'\frac{1}{E_a-H_0+i\eta}H'|\Psi_a^+\rangle\end{aligned}\tag{24}$$

用 $E_a-H_0+i\eta$ 左乘上式并整理(注意(2)式)，得

$$
\begin{aligned}
&H' \frac{1}{E_a - H_0 + i\eta} H' |\Psi_a^+\rangle \\
&= (E_a - H_0 + i\eta)|\Psi_a^+\rangle - \\
&\quad - (E_a - H_0 + i\eta)|\Phi_a\rangle - H'|\Phi_a\rangle \\
&= (E_a - H_0 + i\eta)|\Psi_a^+\rangle - H'|\Phi_a\rangle - i\eta|\Phi_a\rangle
\end{aligned}
$$

将上式代入(23)式左边第二项，得

$$H'|\Psi_a^+\rangle - (E_a - H_0 + i\eta)|\Psi_a^+\rangle = - i\eta|\Phi_a\rangle$$

即

$$(E_a + i\eta - (H_0 + H'))|\Psi_a^+\rangle = i\eta|\Phi_a\rangle$$

考虑到 $H = H_0 + H'$，则由上式可得

$$|\Psi_a^+\rangle = \lim_{\eta \to +0} \frac{i\eta}{E_a - H + i\eta}|\Phi_a\rangle \tag{25}$$

这是一个重要的关系式. 注意到

$$\frac{i\eta}{E_a - H + i\eta} \equiv 1 - \frac{E_a - H}{E_a - H + i\eta}.$$

及

$$H|\Phi_a\rangle = (H_0 + H')|\Phi_a\rangle = E_a|\Phi_a\rangle + H'|\Phi_a\rangle$$

则(25)式可变为另一形式：

$$|\Psi_a^+\rangle = |\Phi_a\rangle + \lim_{\eta \to +0} \frac{1}{E_a - H + i\eta} H'|\Phi_a\rangle \tag{26}$$

类似地，对 $|\Psi_a^-\rangle$，有

$$|\Psi_a^-\rangle = - \lim_{\eta \to +0} \frac{i\eta}{E_a - H - i\eta}|\Phi_a\rangle \tag{27}$$

或

$$|\Psi_a^-\rangle = |\Phi_a\rangle + \lim_{\eta \to +0} \frac{1}{E_a - H - i\eta} H'|\Phi_a\rangle \tag{28}$$

这样，我们便得到了李普曼-许温格方程的"闭合"形式解("closed" form)，即用有限形式表示的解. 从形式上看，它与李普曼-许温格方程有点相似，不过这里出现的是全哈密顿 H 而不是 H_0，此外，方程右边只有 $|\Phi_a\rangle$ 而没有 $|\Psi_a^\pm\rangle$.

表面上看，(26) 式和 (28) 式是用已知的 $|\Phi_a\rangle$ 表示待求的 $|\Psi_a^\pm\rangle$，但问题并未就此得解，这是因为新的逆算符 $(E_a - H \pm i\eta)^{-1}$ 的意义还不清楚. 虽然，我们可以象逆算符 $(E_a - H_0 \pm i\eta)^{-1}$ 那样讨论得到类似(7)式的结果：

$$\frac{1}{E_a - H \pm i\eta}|\Psi_n^{\pm}\rangle = \frac{1}{E_a - E_n \pm i\eta}|\Psi_n^{\pm}\rangle \tag{29}$$

可是，式中$|\Psi_n^{\pm}\rangle$是待求的，因此，不能说$(E_a - H \pm i\eta)^{-1}$已是一个确定的算符. 这样，(26)式和(28)式只是把李普曼-许温格方程(8)式右边的末知态矢量变换成一个末知的算符. 然而，这一变换在形式上是很有用的，我们称这个算符为全格林算符(full Green's operators)：

$$G^{\pm}(E_a) \equiv \frac{1}{E_a - H \pm i\eta} \tag{30}$$

利用算符恒等式

$$\frac{1}{A+B} = \frac{1}{A}\left(1 - B\frac{1}{A+B}\right) \tag{31}$$

可将全格林算符表为：

$$\frac{1}{E_a - H \pm i\eta} \doteq \frac{1}{E_a - H_0 \pm i\eta - H'}$$

$$= \frac{1}{E_a - H_0 \pm i\eta} + \frac{1}{E_a - H_0 \pm i\eta}H'\frac{1}{E_a - H \pm i\eta} \tag{32}$$

即
$$G^{\pm}(E_a) = G_0^{\pm}(E_a) + G_0^{\pm}(E_a)H'G^{\pm}(E_a) \tag{33}$$

此式称为全格林算符的李普曼-许温格方程.

4. 李普曼-许温格方程的级数解

我们将借助于逐次迭代法(the technique of successive iterations)来求解. 取

$$(E_a - H \pm i\eta)^{-1} \simeq (E_a - H_0 \pm i\eta)^{-1}$$

作为零次近似，利用诺埃曼法得到级数表示：

$$\frac{1}{E_a - H \pm i\eta}$$

$$= \frac{1}{E_a - H_0 \pm i\eta} + \frac{1}{E_a - H_0 \pm i\eta}H'\frac{1}{E_a - H_0 \pm i\eta} +$$

$$+ \frac{1}{E_a - H_0 \pm i\eta}H'\frac{1}{E_a - H_0 \pm i\eta}H'\frac{1}{E_a - H_0 \pm i\eta} + \cdots$$

$$\vdots \tag{34}$$

上式中每一项都具有确定的意义，这个级数表示称为算符$(E_a - H$

$\pm i\eta)^{-1}$的玻恩级数.不幸的是,像所有算符级数一样,立即出现收敛的问题,并且不能简单地予以回答.

一旦$(E_a-H\pm i\eta)^{-1}$被确定了,例如用玻恩级数的形式(34)式确定了,把它代入(26)式或(28)式,就可得到$|\Psi_a^+\rangle$和$|\Psi_a^-\rangle$的玻恩级数:

$$
\begin{aligned}
|\Psi_a^\pm\rangle = |\Phi_a\rangle &+ \frac{1}{E_a-H_0\pm i\eta}H'|\Phi_a\rangle + \\
&+ \frac{1}{E_a-H_0\pm i\eta}H'\frac{1}{E_a-H_0\pm i\eta}H'|\Phi_a\rangle + \\
&+ \frac{1}{E_a-H_0\pm i\eta}H'\frac{1}{E_a-H_0\pm i\eta}H'\frac{1}{E_a-H_0\pm i\eta}H'|\Phi_a\rangle \\
&+ \cdots \qquad (35)
\end{aligned}
$$

上式就是李普曼-许温格方程的玻恩级数解.取上式的一级近似,并取坐标表象,就可得到通常的玻恩近似式§2(33)式.注意,(35)式省略了符号$\lim\limits_{\eta\to+0}$.

5. 入射态和出射态及其正交归一性

在形式散射理论中,把$|\Psi_a^+\rangle$称为入射态(incoming state),在坐标表象中,由(22)式表示,它包含未受微扰的入射波(在最简单的情形下是平面波)和出射球面散射波.同样,可以把$|\Psi_a^-\rangle$称为出射态(outgoing state),它包含未受微扰的出射波(在最简单情形下是平面波)和入射球面散射波.

注意,不要把入射态与入射波混淆,也不要把出射态与出射波混淆.in-state$|\Psi_a^+\rangle$和out-state$|\Psi_a^-\rangle$都包含入射波和出射波分量,不同的是,in-state$|\Psi_a^+\rangle$包含入射"平面"波和出射"球面"波;相反地,out-state$|\Psi_a^-\rangle$则是包含入射"球面"波和出射"平面"波.由(8)式可见,未受微扰的("平面")波分量明显地与相加分量(散射波)是分开的,而散射波则由式中分母中的+或-号分别决定的.在物理上,入射态$|\Psi_a^+\rangle$与散射问题的出射波解相联系,因为对势散射情形及在坐标表象中,$\Psi_k^+=\langle r|\Psi_k^+\rangle$是散射问题的"出射解"("outgoing solution")(见(22)式).对应于出射态$|\Psi_a^-\rangle$的波函数

$\Psi_i^- \equiv \langle r|\Psi_i^-\rangle$是散射问题的"入射"解("incoming solution"),但它不描述物理实在,只是在计算中起着与入射态同等重要的作用.

利用"闭合"形式(26)式、(28)式以及李普曼-许温格方程(8)式,可建立入射态$|\Psi_a^+\rangle$与出射态$|\Psi_a^-\rangle$之间的正交归一性关系:①

$$\langle\Psi_a^+|\Psi_b^+\rangle = \langle\Phi_a|\Phi_b\rangle = \delta_{ab} \tag{36}$$

$$\langle\Psi_a^-|\Psi_b^-\rangle = \langle\Phi_a|\Phi_b\rangle = \delta_{ab} \tag{37}$$

如果 H 既有连续态又有分立的束缚态 Ψ_α^B,则有

$$\left.\begin{aligned}\langle\Psi_a^+|\Psi_\alpha^B\rangle = 0\\ \langle\Psi_a^-|\Psi_\alpha^B\rangle = 0\end{aligned}\right\} \tag{38}$$

其中下标 a 标记连续态,α 标记分立态.

此外,尚有完全性关系:

$$\left.\begin{aligned}\sum_a|\Psi_a^+\rangle\langle\Psi_a^+| + \sum_\alpha|\Psi_\alpha^B\rangle\langle\Psi_\alpha^B| = 1\\ \sum_a|\Psi_a^-\rangle\langle\Psi_a^-| + \sum_\alpha|\Psi_\alpha^B\rangle\langle\Psi_\alpha^B| = 1\end{aligned}\right\} \tag{39}$$

§4 S-矩阵 T-矩阵

1. S-矩阵和 T-矩阵的定义

上节我们从薛定谔方程的形式解引入了入射态和出射态的概念以及它们的物理意义,现在我们来讨论 in-state 和 out-state 之间的联系,从而引进 S-矩阵和 T-矩阵.

我们可以把物理过程,例如散射、发射、吸收等等,看作是一种变换,它把"输入"态("input" states)变换为相应的"输出"态("output" states).另一方面,我们又可把相互作用或碰撞过程看作是一个"黑箱"("black box"),数学上用一变换算符来描述.因此,我们可引入如下的变换:

$$|\Psi^{out}\rangle = S|\Psi^{in}\rangle \tag{1}$$

式中$|\Psi^{in}\rangle$和$|\Psi^{out}\rangle$分别称为入射态和出射态(incoming and outgoing

① 参阅 Roman, Advanced Quantum Theory, §4--26, P. 298.

states)，简略写成"in-states"和"out-states". 变换算符 S 则称为散射算符(scattering operator)，或散射矩阵(scattering matrix)，简称为 S-矩阵(S-matrix).

碰撞的普遍理论的中心问题是确定 S 矩阵. 人们希望从一些普遍原则出发找出 S-矩阵，而不必知道相互作用，即体系的哈密顿量. 色散关系(dispersion relation)方法的发展使得这方面的进展有了可能性. 然而，我们将在习惯的量子理论的框架内，用体系的哈密顿量来确定 S-矩阵，这就是场论的方法.

S-矩阵的一个明显的基本性质是它的幺正性. 从(1)式得到

$$\begin{aligned}\langle \Psi^{out} | \Psi^{out} \rangle &= \langle S\Psi^{in} | S\Psi^{in} \rangle \\ &= \langle \Psi^{in} | S^+ S | \Psi^{in} \rangle\end{aligned}$$

及

$$\langle S^{-1}\Psi^{out} | S^{-1}\Psi^{out} \rangle = \langle \Psi^{in} | \Psi^{in} \rangle$$

考虑到几率守恒，由 in-states 的归一性必须有 out-states 的归一性，我们必须要求

$$S^+ S = SS^+ = 1 \tag{2}$$

以保证 $\langle \Psi^{out} | \Psi^{out} \rangle = \langle \Psi^{in} | \Psi^{in} \rangle = 1$. (2)式就是幺正性条件.

2. 跃迁几率和截面

现在假设给定体系的 S-矩阵已经知道，如何通过 S-矩阵来计算跃迁几率(transition probabilities)和截面(cross sections)?

假设 in-state 是给定的自由态 $|i\rangle$，它是可观察量(能量、动量、自旋等)的本征态，即 $|\Psi^{in}\rangle = |i\rangle$. out—state 可按 $|n\rangle$ 的完备集展开：

$$|\Psi^{out}\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \tag{3}$$

显然，由 $|i\rangle$ 态到某一特定态 $|f\rangle$ 的跃迁振幅(transition amplitude)c_f 是

$$\begin{aligned}c_f = \langle f | \Psi^{out} \rangle &= \langle f | S | \Psi^{in} \rangle \\ &= \langle f | S | i \rangle \equiv S_{fi}\end{aligned} \tag{4}$$

然而，这个振幅的平方不是有意义的量，因为它给出无穷长时间内发生的跃迁几率，而任何观察都是在有限时间间隔内进行的. 为了

得到物理上有意义的单位时间内的跃迁几率，定义 T-矩阵如下：

$$S_{fi} = \delta_{fi} - 2\pi i \delta(E_i - E_f) T_{fi} \tag{5}$$

式中

$$T_{fi} = \langle f | T | i \rangle \tag{6}$$

称为跃迁矩阵(transition matrix ,or reaction matrix)T 的矩阵元，T 又简称为 T-矩阵(T-matrix).(5)式中第一项当 $i \neq f$ 时为零，即对于不同态之间的跃迁这项可以忽略，而(5)式中第二项的狄喇克 δ 因子表示不同态之间的跃迁仅当它们的能量相等时才能发生，这是能量守恒的要求．δ 因子前面的系数 $-2\pi i$ 是为了方便引入的.

现在我们来计算单位时间内的跃迁几率．设 $i \neq f$，为了方便，引入

$$S_{fi}^{\tau} = - T_{fi} \frac{i}{\hbar} \int_{-\frac{\tau}{2}}^{\frac{\tau}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}(E_i - E_f)t} \mathrm{d}t \tag{7}$$

注意到

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}px} \mathrm{d}p$$

则有

$$S_{fi} = \lim_{\tau \to \infty} S_{fi}^{\tau} \tag{8}$$

于是，单位时间的跃迁几率为

$$w_{i \to f} = \lim_{\tau \to \infty} \frac{|S_{fi}^{\tau}|^2}{\tau} \tag{9}$$

由(7)式、(9)式及

$$\delta(x) = \frac{1}{\pi} \lim_{\alpha \to \infty} \frac{\sin^2 \alpha x}{\alpha x^2}$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x)$$

立刻可得

$$w_{i \to f} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_i - E_f) |T_{fi}|^2, \quad i \neq f \tag{10}$$

这就是所需要的单位时间跃迁几率与跃迁矩阵之间的关系式，而 T-矩阵与 S-矩阵由(5)式联系.

如果末态是连续谱，态密度(density of states)记为 $\rho(E)$，则跃

迁到 $E_f-\frac{1}{2}\mathrm{d}E \sim E_f+\frac{1}{2}\mathrm{d}E$ 间隔内一群态的跃迁几率为

$$w_{i\to f}^{\text{group}}=\frac{2\pi}{\hbar}\int_{E-\frac{1}{2}\mathrm{d}E}^{E+\frac{1}{2}\mathrm{d}E}\delta(E_i-E_f)\,|T_{fi}|^2\rho(E)\mathrm{d}E$$

$$=\frac{2\pi}{\hbar}\rho(E)\,|T_{fi}|^2 \tag{11}$$

这里我们假定了 ρ 和 T_{fi}是能量的缓慢变化的函数，式中矩阵元及 ρ 中的 $E=E_i=E_f$.

(11)式与黄金规则(golden rule)

$$w_{i\to f}^{(1)}=\frac{2\pi}{\hbar}\rho(E)\,|H'_{fi}|^2$$

具有相同的形式，但后者仅是一个近似的公式，而前者则是精确的. 诚然，在多数的实际情况下，T_{fi}仅能用近似方法进行计算，然后代入(11)式得到 $w_{i\to f}^{\text{group}}$相应的近似解.

一旦求得了跃迁几率，相应的截面的计算简单地由 $w_{i\to f}^{\text{group}}$除以入射流通量(incident flux)而得到，即

$$\sigma=\frac{w_{i\to f}^{\text{group}}}{I_0} \tag{12}$$

式中 I_0为入射粒子流通量.

最后，我们引进新算符 $\mathscr{T}$，其矩阵元由下式定义：

$$\mathscr{T}_{fi}\equiv-2\pi i\delta(E_i-E_f)T_{fi} \tag{13}$$

显然，当 $E_i\neq E_f$ 时，$\mathscr{T}_{fi}=0$. 将上式代入(5)式，可得算符方程

$$S=1+\mathscr{T} \tag{14}$$

将上式代入(1)式，我们有

$$|\Psi^{\text{out}}\rangle-|\Psi^{\text{in}}\rangle=\mathscr{T}\,|\Psi^{\text{in}}\rangle \tag{15}$$

因为在散射过程中，out-states 与 in-states 之间的差是由于相互作用而产生的散射波(scattered wave)，因而，

$$|\Psi^{\text{scat}}\rangle=\mathscr{T}\,|\Psi^{\text{in}}\rangle \tag{16}$$

即算符 $\mathscr{T}$ 把入射态变换为散射波.

3. 时间无关散射的 S-矩阵和 T-矩阵

现在我们要建立 S-矩阵与李普曼-许温格方程的 in 和 out-解

(in-and out -solutions) $|\Psi^{\pm}\rangle$之间的关系.

让我们考虑任意的,可观察量的本征态的完全集$\{|n\rangle\}$,用它们来表征我们所研究的态.用$\langle f|$左乘(1)式并利用完全性关系$\sum_n |n\rangle\langle n|=1$,则有

$$\begin{aligned}\langle f|\Psi^{out}\rangle &= \langle f|S|\Psi^{in}\rangle \\ &= \sum_n \langle f|S|n\rangle\langle n|\Psi^{in}\rangle \qquad (17)\end{aligned}$$

式中$\langle f|\Psi^{out}\rangle$是具有确定$f$的一个特定出射态,而$\langle n|\Psi^{in}\rangle$则是具有确定$n$的一个特定入射态.但是我们知道,这些完全确定的out和in态是李普曼-许温格方程的Ψ_f^-和Ψ_n^+解.这样,我们可以写

$$\langle\Psi_f^-| = \sum_n S_{fn}\langle\Psi_n^+| \qquad (18)$$

其中

$$S_{fn} = \langle f|S|n\rangle \qquad (19)$$

用$|\Psi_i^+\rangle$右乘(18)式,并利用正交归一性关系(§3(36)式),得

$$\begin{aligned}\langle\Psi_f^-|\Psi_i^+\rangle &= \sum_n S_{fn}\langle\Psi_n^+|\Psi_i^+\rangle \\ &= \sum_n S_{fn}\delta_{ni} \\ &= S_{fi}\end{aligned}$$

或写成

$$S_{fi} = \langle\Psi_f^-|\Psi_i^+\rangle = (\Psi_f^-,\Psi_i^+) \qquad (20)$$

这样,确定初态和末态之间的S-矩阵元可以简单地表示为相应的out-和in-states的标积,此out-和in-states是李普曼-许温格方程的解.S-矩阵这个表示极为重要,因为它不要求哈密顿量必须分为未受微扰和微扰两部分.至少在原则上,$|\Psi^{\pm}\rangle$态可以完全由总的哈密顿量决定.诚然,在多数情况下,仅当哈密顿量分为可加性的未受微扰和微扰部分是可能时,$|\Psi^{\pm}\rangle$的计算才能进行.(20)式可作为S-矩阵的另一种定义.

下面,我们将利用$|\Psi^{\pm}\rangle$态的性质来计算S_{fi}.根据(20)式并利用§3(28)式和(29)式,我们有

$$S_{ab} = \langle \Psi_a^- | \Psi_b^+ \rangle = \langle \Phi_a | \Psi_b^+ \rangle + \langle \Phi_a | H' \frac{1}{E_a - H + i\eta} | \Psi_b^+ \rangle$$

$$= \langle \Phi_a | \Psi_b^+ \rangle + \frac{1}{E_a - E_b + i\eta} \langle \Phi_a | H' | \Psi_b^+ \rangle \tag{21}$$

其中右边第一项利用§3(8)式和(7)式可变成

$$\langle \Phi_a | \Psi_b^+ \rangle = \langle \Phi_a | \Phi_b \rangle + \langle \Phi_a | \frac{1}{E_a - H_0 + i\eta} H' | \Psi_b^+ \rangle$$

$$= \delta_{ab} + \frac{1}{E_a - E_b + i\eta} \langle \Phi_a | H' | \Psi_b^+ \rangle \tag{22}$$

将(22)式代入(21)式得

$$S_{ab} = \delta_{ab} + (\frac{1}{E_b - E_a + i\eta} - \frac{1}{E_a - E_b + i\eta}) \langle \Phi_a | H' | \Psi_b^+ \rangle$$

$$= \delta_{ab} + (\frac{-2i\eta}{\eta^2 + (E_b - E_a)^2} \langle \Phi_a | H' | \Psi_b^+ \rangle$$

$$= \delta_{ab} + (\frac{-2i\eta}{\eta^2 + (E_b - E_a)^2} R_{ab} \tag{23}$$

式中
$$R_{ab} = \langle \Phi_a | H' | \Psi_b^+ \rangle \tag{24}$$

利用恒等式

$$\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \to +0} \frac{\eta}{\eta^2 + x^2} = \delta(x)$$

于是得到

$$S_{ab} = \delta_{ab} - 2\pi i \delta(E_b - E_a) R_{ab} \tag{25}$$

将上式与 T-矩阵定义(5)式比较，我们得到

$$R_{ab} \equiv \langle \Phi_a | H' | \Psi_b^+ \rangle = T_{ab} \tag{26}$$

此式与(20)式一样重要，因为从(10)式知道，不同态之间的跃迁几率是通过 T-矩阵元计算的．

实际上，在多数实际情况下，可以利用(26)式计算 T-矩阵．不幸的是，H'的存在意味着 H 必须可分解为 H_0和 H'之和，而且我们还要知道精确解$|\Psi_b^+\rangle$．为了实际的目的，我们可以利用§3(35)式给出的$|\Psi_b^+\rangle$的玻恩级数，从而得到

$$T_{fi} = \langle \Phi_f | H' | \Phi_i \rangle + \langle \Phi_f | H' \frac{1}{E_i - H_0 + i\eta} H' | \Phi_i \rangle$$

$$+ \langle \Phi_f | H' \frac{1}{E_i - H_0 + i\eta} H' \frac{1}{E_i - H_0 + i\eta} H' | \Phi_i \rangle + \cdots \tag{27}$$

这就是T-矩阵的玻恩级数，后项比前项包含更高阶的相互作用.

我们也可以把上式写成另一形式，将"闭合形式"§3(26)式代入本节(26)式便得到

$$T_{fi} = \langle \Phi_f | H' + H' \frac{1}{E_i - H + i\eta} H' | \Phi_i \rangle \tag{28}$$

将逆算符的玻恩展开代入上式亦可得到(27)式. 由上式可将T-矩阵写成算符形式：

$$T = H' + H' \frac{1}{E_i - H + i\eta} H' \tag{29}$$

利用这种表示时必须记住，它的矩阵元是自由参考态$|\Phi_f\rangle$和$|\Phi_i\rangle$之间的矩阵元.

我们引进T-矩阵的另一等价的定义：

$$T | \Phi_a \rangle = H' | \Psi_a^+ \rangle \tag{30}$$

这是因为如果上式成立，则

$$\langle \Phi_b | T | \Phi_a \rangle = \langle \Phi_b | H' | \Psi_a^+ \rangle = T_{ba} \tag{31}$$

与(26)式一致.

(30)式表明，T算符把参考体系的希尔伯特空间中的每一个元素与真实问题的希尔伯特空间中的一定元素联系起来.

利用(30)式，可以将李普曼-许温格方程§3(8)式变成

$$| \Psi_a^+ \rangle = | \Phi_a \rangle + \lim_{\eta \to +0} \frac{1}{E_a - H + i\eta} T | \Phi_a \rangle \tag{32}$$

一旦T-矩阵已知，这个方程便给出了从$|\Phi_a\rangle$计算$|\Psi_a^+\rangle$的简便的方法. 利用T-算符的玻恩级数

$$T = H' + H' \frac{1}{E - H_0 + i\eta} H'$$
$$+ H' \frac{1}{E - H_0 + i\eta} H' \frac{1}{E - H_0 + i\eta} H' + \cdots \tag{33}$$

代入(32)式亦可得到$|\Psi_a^+\rangle$的玻恩级数，即§3(35)式.

由$T_{ab} \equiv R_{ab} \equiv R_{ab}^+$，人们常常定义一个相关的算符

$$T^{-}_{ab} \equiv R^{-}_{ab} = \langle \Phi_a | H' | \Psi^{-}_{b} \rangle \tag{34}$$

当 T 和 T^- 被同时应用时，通常将 T 记为 T^+. 算符 T^- 在联系 $|\Phi_a\rangle$ 和 $|\Psi^-_a\rangle$ 中所起的作用与 T^+ 在联系 $|\Phi_a\rangle$ 和 $|\Psi^+_a\rangle$ 中所起的作用相同.

§5 含时散射理论

本节我们将研究时间相关体系的 S-矩阵如何定义和计算.

在时间相关的散射中，我们把入射态看作无限远过去时刻 (infinitely remate past instant) 的态矢量，把出射态看作无限远将来时刻 (infinitely late future instant) 的态矢量，即

$$\left.\begin{aligned} |\Psi^{\rm in}\rangle &= |\Psi(-\infty)\rangle \\ |\Psi^{\rm out}\rangle &= |\Psi(+\infty)\rangle \end{aligned}\right\} \tag{1}$$

根据 S-矩阵的普遍定义 § 4(1)式，也可以把 S-矩阵的定义写作

$$|\Psi(+\infty)\rangle = S|\Psi(-\infty)\rangle \tag{2}$$

在时间相关散射中，S-矩阵的这个定义从直觉上似乎是正确的，后面我们将证明，(2)式定义的 S-矩阵与时间无关散射中 § 4(20)式确定的 S-矩阵是等同的.

(2)式的基本特点，可以把 S-矩阵看作是把无限过去时刻和相应的无限未来时刻的态联系起来的时间演化算符. 当我们计算时间演化算符时，在原则上既可用薛定谔绘景，也可以用相互作用绘景. 然而，在讨论动力学问题(例如碰撞现象)时，相互作用绘景比薛定谔绘景更为合适. 因此，下面我们将在相互作用绘景中进行讨论. 与薛定谔绘景不同，相互作用绘景适用于洛仑兹不变性体系，例如基本粒子的相对论量子场论.

时间相关散射问题的 S-矩阵也可以在海森堡绘景中定义，这里我们将不讨论.

1. 在相互作用绘景中的时间演化

在相互作用绘景中的态矢量的动力学方程由下式给出(参阅第五章 § 3(50)式)：

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial|\Psi(t)\rangle}{\partial t}+H'|\Psi(t)\rangle=0 \tag{3}$$

式中 H' 是相互作用哈密顿量，可以引入时间演化算符 $U(t,t_0)$，使得

$$|\Psi(t)\rangle=U(t,t_0)|\Psi(t_0)\rangle \tag{4}$$

把上式代入(3)式，注意到 $|\Psi(t_0)\rangle$ 是任意的，便得到 $U(t,t_0)$ 满足的微分方程：

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial U(t,t_0)}{\partial t}+H'U(t,t_0)=0 \tag{5}$$

显然，初始条件为

$$U(t_0,t_0)=1 \tag{6}$$

把(5)式、(6)式与第五章§3(58)式和(59)式比较可以看出，相互作用绘景中的时间演化算符与从海森堡绘景过渡到相互作用绘景的变换算符一致.

象在薛定谔绘景中建立时间演化算符的基本性质时的过程一样，可以建立相应的类似关系：

$$U(t,t_0)=U(t,t_1)U(t_1,t_0) \tag{7}$$

$$U^{-1}(t,t_0)=U(t_0,t) \tag{8}$$

$$U(t,t_0)U^{+}(t,t_0)=U^{+}(t,t_0)U(t,t_0)=1 \tag{9}$$

$$U^{+}(t,t_0)=U(t_0,t) \tag{10}$$

(10)式可由(8)式和(9)式结合而得.

U 的另一重要性质是它与薛定谔绘景中的时间演化算符 U_S（在第五章§3(4)式中用 U 代表时间演化算符，此处用 U_S 以免跟本节的 U 相混）及联系薛定谔绘景和相互作用绘景的算符 U_0（第五章§3式(45)）之间的关系，即①

$$U(t_2,t_1)=U_0(t_0,t_2)U_S(t_2,t_1)U_0(t_1,t_0) \tag{11}$$

下面我们研究时间演化算符的计算问题.

2. 戴逊(Dyson)的微扰理论

① 参阅 Roman, Advanced Quantum Theory, § 4—3, P. 310.

首先把算符 $U(t,t_0)$ 的微分方程(5)式及初始条件(6)式变换为积分方程. 直接积分,我们得维他里(Volterra)型基本积分方程:

$$U(t,t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H'(t')U(t',t_0)\mathrm{d}t' \qquad (12)$$

因为维他里方程的诺埃曼-刘维(Neumann-Liouville)级数展开总是收敛的,故可以用逐次近似法求解(12)式. 作为零级近似,

$$U^{(0)}(t,t_0) = 1 \qquad (12)$$

代入(12)式得一次近似

$$U^{(1)}(t,t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H'(t')\mathrm{d}t' \qquad (12)$$

二次近似是

$$U^{(2)}(t,t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H'(t')\mathrm{d}t'$$

$$+ \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2\int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{t'} H'(t')H'(t'')\mathrm{d}t''\mathrm{d}t' \qquad (15)$$

继续下去,可得级数展开

$$U(t,t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} U_n(t,t_0) \qquad (16)$$

式中

$$U_n(t,t_0) = \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n\int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{t'}\cdots\int_{t_0}^{t^{(n-1)}} H'(t')H'(t'')\cdots H'(t^{(n)})\mathrm{d}t^{(n)}\cdots\mathrm{d}t' \qquad (17)$$

在这里要注意,不同时刻的相互作用 H' 一般说来互不对易,例如 $H'(t')\neq H'(t'')$. 上式中积分上限的排列顺序是

$$t_0 \leqslant t^{(n)} \leqslant t^{(n-1)} \leqslant \cdots \leqslant t' \leqslant t \qquad (18)$$

即(17)式中 H' 算符是按时间宗量增加的次序从右到左排列. 由于被积函数依赖于时间次序和积分上限的不同,给 $U^{(n)}$ 的计算造成困难,但利用某些技巧,使积分上限变为相同,计算便可大为简化. 戴逊首创的方法可以达到此目的.

戴逊方法的关键步骤是形式地引入编时算符(chronological ordering operator)P,其定义如下:

若 A、B 是任意的与时间有关的算符，则

$$P(A(t_1)B(t_2)) = \begin{cases} A(t_1)B(t_2), & \text{当 } t_1 > t_2 \\ B(t_2)A(t_1), & \text{当 } t_1 < t_2 \end{cases} \tag{19}$$

换句话说，P 使含时算符按时间先后从右到左的次序 排列. 更一般地，对 n 个含时算符的乘积，P 定义为

$$P(A_i(t_i)A_j(t_j)\cdots A_k(t_k)) = A_1(t_1)A_2(t_2)\cdots A_n(t_n) \tag{20}$$

$$(t_1 > t_2 > \cdots > t_n)$$

现在我们来证明，由于引入了编时算符 P，(17)式中所有上限如何能够变为等于 t. 让我们考虑量

$$I_n(t,t_0) = \int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{t}\cdots\int_{t_0}^{t} P[H'(t')H'(t'')\cdots H'(t^{(n)})]\mathrm{d}t^{(n)}\cdots\mathrm{d}t' \tag{21}$$

由于 P 的存在，被积表达式对全部变数 $t', t'', \cdots, t^{(n)}$ 而言是完全对称的，即使其中因子不对易亦如此. 变数可以有 $n!$ 种方式排列，因而 I_n 的值是算符间的某一特殊排列次序对积分贡献的 $n!$ 倍. 例如取(18)式的时序，则有

$$I_n(t,t_0) = n!\int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{t'}\cdots\int_{t_0}^{t^{(n-1)}} H'(t')H'(t'')\cdots H'(t^{(n)})\mathrm{d}t^{(n)}\cdots\mathrm{d}t' \tag{22}$$

比较(21)式与(22)式，则(17)式可改写成

$$U_n(t,t_0) = \frac{1}{n!}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n\int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{t}\cdots\int_{t_0}^{t} P(H'(t')H'(t'')\cdots H'(t^{(n)}))\mathrm{d}t'\cdots\mathrm{d}t^{(n)} \tag{23}$$

这就是我们所需要证明的. 明显地，式中所有上限都等于 t.

读者可能会怀疑以上结果是否应该给予太高的评价，其理由是(23)式完全是形式的，因为我们并不知道编时算符 P 的明显表示. 幸好情况并非这样. 如果对易关系已知，则 H' 诸因子的编时乘积 (chronological product)能够简化为明显的表示. 设 $H'(t_1)$ 和 $H'(t_2)$ 的对易子记为 $D(t_1,t_2)$

$$D(t_1,t_2) \equiv [H'(t_1), H'(t_2)] \tag{24}$$

那么，由于定义(19)式，我们有

$$P(H'(t_1),H'(t_2)) = H'(t_1)H'(t_2) - \Theta(t_2 - t_1)D(t_1 - t_2) \tag{25}$$

式中
$$\Theta(t_2 - t_1) = \begin{cases} 1, & 当\ t_2 > t_1 \\ 0, & 当\ t_2 \leqslant t_1 \end{cases} \tag{26}$$
推广到多因子是明显的,并且编时乘积的约简适合于每一特殊情形,特殊有效的方法已被建立,例如在量子场论中.

当 $U_n(t,t_0)$ 由(23)式表示时,级数展开(16)式有时候可改写成"闭合"的形式:
$$U(t,t_0) = P\exp\left[1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H'(t')\mathrm{d}t'\right] \tag{27}$$
当然,"编时指数"形式的严格意义是其级数展开.

综上所述,我们建立了有用的近似方法.逐次近似法给出
$$\left.\begin{aligned} U^{(0)} &= U_0 = 1 \\ U^{(1)} &= U_0 + U_1 \\ U^{(2)} &= U_0 + U_1 + U_2 \\ &\vdots \\ U^{(n)} &= U^{(n-1)} + U_n \end{aligned}\right\} \tag{28}$$
如果 H' 包含某一参数(耦合常数),则 $U^{(n)}$ 包含直到这一参数的 n 次幂的项.

这样,在相互作用绘景中作微扰处理的方法叫协变微扰论(covariant purterbation theory),"协变"是指这种微扰论的结果满足洛仑兹不变性的要求.在薛定谔绘景中作微扰处理的理论叫非协变微扰论,或叫旧式微扰论.

3. S-矩阵的确定

我们将在相互作用绘景中,利用上面所得结果来计算时间相关散射问题中的 S-矩阵.

考虑到 S-矩阵可以表示为时间演化算符 $U(t,t_0)$ 当 $t_0 \to -\infty$, $t \to +\infty$ 时的极限,即
$$S = \lim_{\substack{t_0 \to -\infty \\ t \to +\infty}} U(t,t_0) \tag{29}$$
或
$$S = U(+\infty, -\infty) \tag{30}$$
作为我们的出发点,根据上述戴逊方法,可以用级数展开来表示

S-矩阵：

$$S = \sum_{n=0}^{\infty} S_n \tag{30}$$

式中 $S_n \equiv U_n(+\infty, -\infty)$

$$= \frac{1}{n!}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} P(H'(t') \cdots H'(t^{(n)})) \mathrm{d}t^{(n)} \cdots \mathrm{d}t' \tag{32}$$

象(27)式那样，可把 S-矩阵表示为

$$S = \mathrm{P}\exp\left[\left(\frac{-i}{\hbar}\right)\int_{-\infty}^{+\infty} H'(t')\mathrm{d}t'\right] \tag{33}$$

由此可见，由于编时算符 P 的引入，使 S-矩阵的表式大为简化. S-矩阵的逐次近似是

$$\left.\begin{aligned} S^{(0)} &= S_0 = 1 \\ S^{(1)} &= S_0 + S_1 \\ S^{(2)} &= S_0 + S_1 + S_2 \\ &\vdots \\ S^{(n)} &= S^{(n-1)} + S_n \end{aligned}\right\} \tag{34}$$

其中 S_n 由(32)式给出. 取属于某一完全集的确定初态和末态间的矩阵元，我们便得到第 n 级近似

$$\langle f | S^{(n)} | i \rangle = \delta_{fi} + (S_1)_{fi} + \cdots + (S_n)_{fi} \tag{35}$$

将上式与 § 4(5)式及 § 4(14)式比较，可以看出：(a) S-矩阵的零级近似与散射问题无关；(b)在 n 级近似中，$\mathscr{T}$ 可表示为

$$\mathscr{T}^{(n)} = S_1 + S_2 + \cdots + S_n \tag{36}$$

一旦用这种方法确定了 T-矩阵，跃迁几率便可根据 § 4(10)式或(11)式计算.

4. 莫勒波算符

在以上的讨论中，有一个很重要的问题，就是(29)式定义的 $U(t, t_0)$ 当 $t_0 \to -\infty$，$t \to +\infty$ 时的极限存在，才能在 S-矩阵的一系列公式中代之以 $t_0 = -\infty$ 和 $t = +\infty$. 但是，由于(27)式中的 $H'(t)$ 是相互作用绘景中的算符，它与薛定谔绘景中的 H'^{S} 有如下的关系(见第五章 § 3(42)式、(45)式)：

$$H'(t) = e^{\frac{i}{\hbar}tH_0} H'^{S}(t) e^{-\frac{i}{\hbar}tH_0} \tag{37}$$

即使 H'^{S}不随时间变化，$H'(t)$也是时间的函数，而且当 t 很大时，$U(t,t')$成为随时间急速振荡的算符，不能保证上述极限存在. 为了消去这种无意义的振荡，可以借助相互作用的绝热开关的方法(device of adiabatic switching)，引入一个切断因子，即用

$$H'_{ad}(t) = e^{-\eta|t|} H'(t) \tag{38}$$

代替 $H'(t)$，并对所得结果取极限 $\lim\limits_{\eta\to+0}$.

现在我们介绍由 Gell-mann 和 Goldberger 引入与此有关的更有效的方法. 这个方法有助于我们更深刻地理解散射问题.

为此，首先引入一个任意的时间 t 的平滑变化函数 $f(t)$，定义为

$$\left.\begin{aligned} \lim_{t\to-\infty} f(t) &= \lim_{\eta\to+0} \eta \int_{-\infty}^{0} e^{\eta t'} f(t')\mathrm{d}t' \\ \lim_{t\to+\infty} f(t) &= \lim_{\eta\to+0} \eta \int_{0}^{\infty} e^{-\eta t'} f(t')\mathrm{d}t' \end{aligned}\right\} \tag{39}$$

对上式作分部积分，得

$$\lim_{t\to-\infty} f(t) = [f(t')e^{\eta t'}]_{-\infty}^{0} - \int_{-\infty}^{0} \frac{df}{dt'} e^{\eta t'}\mathrm{d}t'$$

$$\lim_{t\to+\infty} f(t) = [f(t')e^{-\eta t'}]_{0}^{\infty} - \int_{0}^{\infty} \frac{df}{dt'} e^{-\eta t'}\mathrm{d}t'$$

假定 f 当 $t=-\infty(+\infty)$ 时有适当的极限，记为 $f(-\infty)[f(+\infty)]$，那么上式取极限 $\eta\to+0$后，便得到

$$\left.\begin{aligned} \lim_{t\to-\infty} f(t) &= f(-\infty) \\ \lim_{t\to+\infty} f(t) &= f(+\infty) \end{aligned}\right\} \tag{40}$$

若假定 f 当 $t\to-\infty(+\infty)$时振荡，例如

$$\begin{aligned} \lim_{t\to-\infty} \sin t &= \lim_{\eta\to+0} \eta \int_{-\infty}^{0} \sin t' e^{\eta t'} f(t')\mathrm{d}t' \\ &= \lim_{\eta\to+0} \eta \left[\frac{e^{\eta t'}}{\eta^2+1}(\eta \sin t' - \cos t')\right]_{-\infty}^{0} \\ &= \lim_{\eta\to+0} \eta \left[\frac{1}{\eta^2+1}(0-1) - \frac{0}{\eta^2+1}(\text{振荡项})\right] \end{aligned}$$

$$= \lim_{\eta \to +0} \eta \left[- \frac{n}{\eta^2 + 1} \right] = 0$$

同理
$$\lim_{t \to +\infty} \sin t = \lim_{\eta \to +0} \eta \int_0^\infty \sin t' e^{-\eta t'} f(t') \mathrm{d}t'$$

$$= \lim_{\eta \to +0} \eta \left[\frac{-n}{\eta^2 + 1} \right] = 0$$

可见，$\lim\limits_{\eta \to +0} f(t)$的定义(39)式可以消去振荡项.

现在我们定义四个算符：

$$U(t, -\infty) \equiv \lim_{t_0 \to -\infty} U(t, t_0) = \lim_{\eta \to +0} \eta \int_{-\infty}^0 e^{\eta t'} U(t, t') \mathrm{d}t' \quad (41a)$$

$$U(+\infty, t_0) \equiv \lim_{t_0 \to +\infty} U(t, t_0) = \lim_{\eta \to +0} \eta \int_0^\infty e^{-\eta t'} U(t', t_0) \mathrm{d}t' \quad (41b)$$

$$U(-\infty, t_0) \equiv \lim_{t \to -\infty} U(t, t_0) = \lim_{\eta \to +0} \eta \int_{-\infty}^0 e^{\eta t'} U(t', t_0) \mathrm{d}t' \quad (41c)$$

$$U(t, +\infty) \equiv \lim_{t \to +\infty} U(t, t_0) = \lim_{\eta \to +0} \eta \int_0^\infty e^{-\eta t'} U(t, t') \mathrm{d}t' \quad (41d)$$

我们将证明，这里定义的具有无限时间宗量的 U-算符与具有有限时间宗量的算符 $U(t, t_0)$具有相同的性质，为此首先研究它们满足的积分方程. 将(12)式代入(41a)，我们有

$$U(t, -\infty) = \lim_{\eta \to +0} \eta \int_{-\infty}^0 e^{\eta t'} \left[1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t H'(t'') U(t'', t') \mathrm{d}t'' \right] \mathrm{d}t'$$

$$= \lim_{\eta \to +0} \left[e^{\eta t'} \right]_{-\infty}^0$$

$$- \frac{i}{\hbar} \lim_{\eta \to +0} \eta \int_{-\infty}^0 \int_{t'}^t e^{\eta t'} H'(t'') U(t'', t') \mathrm{d}t'' \mathrm{d}t'$$

上式二重积分范围是图8-5中的阴影区域. 若将积分下限 t'扩展为$-\infty$，则应减去点线区域的贡献. 交换积分的次序(由于指数收敛因子的存在，交换积分次序是允许的)，便得

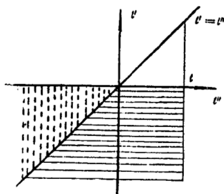


图 8-5

$$U(t,-\infty)=1-\{\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}\mathrm{d}t''[H'(t'')\lim_{\eta\to+0}\eta\int_{-\infty}^{0}e^{\eta t'}U(t'',t')\mathrm{d}t']$$

$$-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t'}\mathrm{d}t''[H'(t'')\lim_{\eta\to+0}\eta\int_{t'}^{0}e^{\eta t'}U(t'',t')\mathrm{d}t']\}$$

由于$\int_{t'}^{0}e^{\eta t'}U(t'',t')\mathrm{d}t'$是收敛积分，因而

$$\lim_{\eta\to+0}\eta\int_{t'}^{0}e^{\eta t'}U(t'',t')\mathrm{d}t'=0$$

于是，我们得到

$$U(t,-\infty)=1-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}\mathrm{d}t''[H'(t'')\lim_{\eta\to+0}\eta\int_{-\infty}^{0}e^{\eta t'}U(t'',t')\mathrm{d}t']$$

利用(41a)式的定义，最后得到

$$U(t,-\infty)=1-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}H'(t'')U(t'',-\infty)\mathrm{d}t'' \tag{42}$$

上式与(12)式中形式上令$t_0=-\infty$所得结果完全一样，这就证明了$U(t,-\infty)$与$U(t,t_0)$满足同样的积分方程. 此外，还可证明，$U(t,-\infty)$与$U(t,t_0)$的其他性质亦相同，①例如

$$U(t,t_1)U(t_1,-\infty)=U(t,-\infty) \tag{43}$$

$$U^+(t,-\infty)=U(-\infty,t) \tag{44}$$

对于(41b)－(41d)式定义的$U(+\infty,t_0)U(-\infty,t_0)$及$U(t,+\infty)$，同样的考虑便可得到相应的结果. 归纳起来，(41)式定义的四个算符的性质，可由$U(t,t_0)$的如下性质：

$$U(t,t_0)=1-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}H'(t')U(t',t_0)\mathrm{d}t' \tag{12}$$

$$U(t,t_1)U(t_1,t_0)=U(t,t_0) \tag{7}$$

$$U^+(t,t_0)=U(t_0,t) \tag{10}$$

分别令$t_0=\pm\infty$或$t=\pm\infty$代入以上诸式得到.

特别重要的是算符：

$$U(0,-\infty)\equiv\Omega^{(+)} \tag{45a}$$

$$U(0,+\infty)\equiv\Omega^{(-)} \tag{45b}$$

① 参阅 Roman, Advanced Quantum Theory, §4－3, P. 318.

它们分别由(41a)和(41d)式中令 $t=0$得到. 这两个时间无关的算符称莫勒波算符(Møller wave operators). 现在我们着手建立它们的性质和讨论它们的物理意义.

我们限于讨论 H_0和 H'不显含时间的情形. 由于在碰撞的普遍理论中我们处理封闭系,假定哈密顿量与时间无关不会影响所得结果的应用.

将第五章§3(4)式和(45)式

$$U_S(t_2,t_1)=\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t_2-t_1)H^S\right]$$

$$U_0(t_2,t_1)=\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t_1-t_2)H_0^S\right]$$

代入(11)式得

$$U(t_2,t_1)=\exp\left[\frac{i}{\hbar}(t_2-t_0)H_0^S\right]\exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t_2-t_1)(H_0^S-H'^S)\right]$$

$$\exp\left[\frac{i}{\hbar}(t_0-t_1)H_0^S\right] \tag{46}$$

由此得到(令 $t_0=0$,并将 t_1改写成 t')

$$U(0,t')=e^{\frac{i}{\hbar}t'(H_0+H')}e^{-\frac{i}{\hbar}t'H_0} \tag{47}$$

式中 H_0和 H'是指薛定谔绘景中的量. 但由于 H 不显含时间,故薛定谔绘景中和相互作用绘景中的 H_0相同(第五章§3(47)式). 将上式代入(41a),我们得到

$$U(0,-\infty)=\lim_{\eta\to+0}\eta\int_{-\infty}^{0}e^{\eta t'}e^{\frac{i}{\hbar}t'H}e^{-\frac{i}{\hbar}t'H_0}\mathrm{d}t' \tag{48}$$

注意上式中 H 与 H_0一般不对易,故两指数项不能合并在一起. 为了避免这个困难,我们把上式作用到参考问题的定态本征矢 $|\Phi_a\rangle$上,注意 $H_0|\Phi_a\rangle=E_a|\Phi_a\rangle$,可以用 H_0的本征值 E_a代替 H_0,于是得到

$$U(0,-\infty)|\Phi_a\rangle=\lim_{\eta\to+0}\eta\int_{-\infty}^{0}\exp\left\{t'\left[\eta-\frac{i}{\hbar}E_a+\frac{i}{\hbar}H\right]\right\}\mathrm{d}t'\,|\Phi_a\rangle$$

$$=\lim_{\eta\to+0}\eta\left\{\frac{\hbar}{i}\frac{1}{H-E_a-i\hbar\eta}e^{\frac{i}{\hbar}[H-E_a-i\hbar\eta]t'}\Big|_{-\infty}^{0}\right\}|\Phi_a\rangle$$

$$= \lim_{\eta \to +0} \frac{-i\eta\hbar}{H - E_a - i\hbar\eta} |\Phi_a\rangle \tag{49}$$

记 $\varepsilon = \hbar\eta$，则得

$$U(0, -\infty)|\Phi_a\rangle = \lim_{\varepsilon \to +0} \frac{i\varepsilon}{E_a - H + i\varepsilon} |\Phi_a\rangle \tag{50}$$

如果 $|\Phi_a\rangle$ 是在能谱的连续区内，利用 $|\Psi_a^+\rangle$ 的闭合形式表示 § 3 (25)式，我们可得到重要的关系：

$$\Omega^{(+)}|\Phi_a\rangle \equiv U(0, -\infty)|\Phi_a\rangle = |\Psi_a^+\rangle \tag{51}$$

可见，莫勒算符 $\Omega^{(+)} = U(0, -\infty)$ 将参考问题的任意连续谱本征态变成真实散射问题的相应的入射态 $|\Psi_a^+\rangle$. 但应注意，上式在某种意义上仅是形式的关系，它还不能给出 $\Omega^{(+)}$. 事实上，(51)式是解李普曼-许温格方程的一种方法. 应用这种方法时我们首先应该解 $U(t, -\infty)$ 的积分方程，由此确定 $U(0, -\infty)$，即 $\Omega^{(+)}$. 在许多情形下，解 $U(t, -\infty)$ 的积分方程比解 $|\Psi^+\rangle$ 或 T 的积分方程要简单得多.

将 H' 作用到(51)式，并注意 § 4(30)式，我们可以得到莫勒算符与 T-矩阵之间的关系

$$H'\Omega^{(+)} = T \quad 或 \quad H'U(0, -\infty) = T \tag{52}$$

另一方面，将 H 作用到(51)式，并注意 $H|\Psi_a^+\rangle = E_a|\Psi_a^+\rangle$, $H_0|\Phi_a\rangle = E_a|\Phi_a\rangle$，我们得到

$$\begin{aligned} HU(0, -\infty)|\Phi_a\rangle &= H|\Psi_a^+\rangle = E_a|\Psi_a^+\rangle \\ &= E_a U(0, -\infty)|\Phi_a\rangle \\ &= U(0, -\infty)E_a|\Phi_a\rangle \\ &= U(0, -\infty)H_0|\Phi_a\rangle \end{aligned}$$

由于 $|\Phi_a\rangle$ 是任意的，因而得到

$$HU(0, -\infty) = U(0, -\infty)H_0, \quad 或 \quad H\Omega^{(+)} = \Omega^{(+)}H_0 \tag{53}$$

这是波算符的另一有用的性质.

最后，我们给出莫勒算符的显式. 正象在多数问题中那样，假定 H_0 没有束缚态(bound states). 这时连续谱的态 $|\Phi_a\rangle$ 组成完全集，

有 $\sum_a |\Phi_a\rangle\langle\Phi_a| = 1$. 用 $\langle\Phi_a|$ 右乘(51)式并对 a 求和，则得

$$\Omega^{(+)} \equiv U(0, -\infty) = \sum_a |\Psi_a^+\rangle\langle\Phi_a| \quad (54)$$

这是一个很有用的明显表示. 但严格说来，它仅当 H_0 没有束缚态时才是正确的. 由上式可见 $\Omega^{(+)}$ 的物理意义可陈述如下：$\Omega^{(+)}$ 是一个投影算符(projection operator)，它把 H_0 的希尔伯特空间中连续谱的本征态矢 $|\Phi_a\rangle$ 投影到 H 的希尔伯特空间中连续谱的本征态矢 $|\Psi_a^+\rangle$.

完全类似地可以推出另一个莫勒算符 $\Omega^{(-)} \equiv U(0, +\infty)$ 的性质，例如

$$\Omega^{(-)}|\Phi_a\rangle \equiv U(0, +\infty)|\Phi_a\rangle = |\Psi_a^-\rangle \quad (55)$$

$$HU(0, +\infty) = U(0, +\infty)H_0, \quad \text{或} \quad H\Omega^{(-)} = \Omega^{(-)}H_0 \quad (56)$$

$$\Omega^{(-)} \equiv U(0, +\infty) = \sum_a |\Psi_a^-\rangle\langle\Phi_a| \quad (57)$$

注意到(44)式及对 $U^+(t, +\infty)$ 的类似等式，可得

$$\Omega^{(+)^+} = U(-\infty, 0), \quad \Omega^{(-)^+} = U(+\infty, 0) \quad (58)$$

因而(51)式和(55)式可分别写成

$$U^+(-\infty, 0)|\Phi_a\rangle = |\Psi_a^+\rangle \quad (59)$$

$$U^+(+\infty, 0)|\Phi_a\rangle = |\Psi_a^-\rangle \quad (60)$$

下面讨论莫勒算符作用到 H 的束缚态的结果. 由(54)式和(57)式，我们有

$$\Omega^{(\pm)^+} = \sum_a |\Phi_a\rangle\langle\Psi_a^\pm| \quad (61)$$

由于所有束缚态与散射态正交，$\langle\Psi_a^\pm|\Psi_a^\beta\rangle = 0$，所以，当上式作用于束缚态 $|\Psi_a^\beta\rangle$ 时得

$$\Omega^{(\pm)^+}\Psi_a^\beta \equiv U(\mp\infty, 0)\Psi_a^\beta = \sum_a |\Phi_a\rangle\langle\Psi^\pm|\Psi_a^\beta\rangle = 0 \quad (62)$$

即算符 $\Omega^{(\pm)^+}$ 消灭所有束缚态. 类似地，当 $\Omega^{(\pm)}$ 作用于 H_0 的束缚态 $|\Phi_a^\beta\rangle$ 时，亦可得

$$\Omega^{(\pm)}|\Phi_a^\beta\rangle \equiv U(0, \pm\infty)|\Phi_a^\beta\rangle = 0 \quad (63)$$

最后我们研究莫勒算符是不是幺正的. 不管 H_0 有无束缚态，

我们只限于能谱的连续部分，从而可以利用(54)式和(57)式. 再利用(61)式和正交归一化条件$\langle\Phi_a|\Phi_b\rangle=\delta_{ab}$，则有

$$
\begin{aligned}
U(0,-\infty)U^+(0,-\infty) &\equiv \Omega^{(+)}\Omega^{(+)^+} = \\
&= \sum_{a,b}|\Psi_a^+\rangle\langle\Phi_a|\Phi_b\rangle\langle\Psi_b^+| \\
&= \sum_{a,b}|\Psi_a^+\rangle\langle\Psi_b^+|\delta_{ab} \\
&= \sum_{a}|\Psi_a^+\rangle\langle\Psi_a^+| \qquad (64)
\end{aligned}
$$

考虑到完全性公式§3(39)式，有

$$
\sum_a|\Psi_a^+\rangle\langle\Psi_a^+| = 1-\Lambda \qquad (65)
$$

式中

$$
\Lambda \equiv \sum_a|\Psi_a^B\rangle\langle\Psi_a^B| \qquad (66)
$$

Λ可以看作是H的分立谱的本征矢所张的空间中的投影算符.

这样，由(64)式和(65)式给出

$$
U(0,-\infty)U^+(0,-\infty) \equiv \Omega^{(+)}\Omega^{(+)^+} = 1-\Lambda \qquad (67)
$$

另一方面

$$
\begin{aligned}
U^+(0,-\infty)U(0,-\infty) &\equiv \Omega^{(+)^+}\Omega^{(+)} \\
&= \sum_{a,b}|\Phi_a\rangle\langle\Psi_a^+|\Psi_b^+\rangle\langle\Phi_b| \\
&= \sum_a|\Phi_a\rangle\langle\Phi_a| \qquad (68)
\end{aligned}
$$

参考态的完全性关系为

$$
\sum_a|\Phi_a\rangle\langle\Phi_a| = 1-\Lambda_0 \qquad (69)
$$

式中

$$
\Lambda_0 \equiv \sum_a|\Phi_a^B\rangle\langle\Phi_a^B| \qquad (70)
$$

是H_0的分立谱的本征矢所张空间中的投影算符.

这样，由(68)式和(69)式给出

$$
U^+(0,-\infty)U(0,-\infty) \equiv \Omega^{(+)^+}\Omega^{(+)} = 1-\Lambda_0 \qquad (71)
$$

考察(67)式和(71)式得出结论：$\Omega^{(+)}\equiv U(0,-\infty)$当且仅当$H$

和 H_0 都没有分立的束缚态时是幺正的. 如果仅 H 或 H_0 有束缚态,则 $\Omega^{(+)}$ 是左(右)等距算符.

完全类似地,我们可以得到

$$U(0,+\infty)U^+(0,+\infty) \equiv \Omega^{(-)}\Omega^{(-)^+} = 1 - \Lambda \tag{72}$$

$$U^+(0,+\infty)U(0,+\infty) \equiv \Omega^{(-)^+}\Omega^{(-)} = 1 - \Lambda_0 \tag{73}$$

在结束本段时我们给出势散射情况下莫勒算符的表示. 取(54)式或(57)式在坐标表象中的矩阵元,容易得到

$$\langle r'|\Omega^{(\pm)}|r''\rangle = \sum_k \langle r'|\Psi_k^\pm\rangle\langle\Phi_k|r''\rangle$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3}\int \Psi_k^\pm(r')e^{-ik\cdot r''}dk \tag{74}$$

5. 时间无关和时间相关散射中 S-矩阵的等价性

现在我们来证明,在时间无关散射理论的框架内定义的 S-矩阵

$$|\Psi^-\rangle = S|\Psi^+\rangle, \quad 或 \quad S_{fi} = \langle\Psi_f^-|\Psi_i^+\rangle$$

与时间相关散射理论中定义的 S-矩阵

$$|\Psi(+\infty)\rangle = S|\Psi(-\infty)\rangle$$

是等价的.

首先,S 是在相互作用绘景中联系无限过去态与无限未来态的时间演化算符,即 $S = U(+\infty,-\infty)$. 现在我们来证明,U 中时间宗量为无穷时是有意义的. 上面已证明过,其中之一的时间宗量为无穷时是有意义的(见(42)式),对于两个时间宗量为无穷的情形,利用(39)式,有

$$S \equiv U(+\infty,-\infty) = \lim_{\eta\to+0}\eta\int_{-\infty}^0 e^{\eta t'}U(+\infty,t')dt' \tag{75}$$

这是因为 $U(+\infty,t')$ 已经证明是存在的. 利用(7)式得

$$U(+\infty,t') = U(+\infty,t)U(t,t')$$

代入(75)式,于是得

$$S = U(+\infty,t) = \lim_{\eta\to+0}\int_{-\infty}^0 e^{\eta t'}U(t,t')dt'$$

$$= U(+\infty,t)U(t,-\infty) \tag{76}$$

其中最后一步用了(41a)式. 因为 t 是任意有限的瞬时,为了方便,我们取 $t=0$,于是得到

$$S=U(+\infty,0)U(0,-\infty)=\Omega^{(-)^+}\Omega^{(+)} \tag{77}$$

可见,S-矩阵可表为两个莫勒算符的乘积.

在时间无关散射问题中,基的自然选择是利用参考问题的连续本征态,即 $|i\rangle=|\Phi_i\rangle$, $|f\rangle=|\Phi_f\rangle$. 注意到(77)式及(51)式、(60)式,我们得到

$$\begin{aligned}S_{fi}&=\langle\Phi_f|S|\Phi_i\rangle=\langle\Phi_f|U(+\infty,0)U(0,-\infty)|\Phi_i\rangle\\&=\langle\Psi_f^-|\Psi_i^+\rangle\end{aligned} \tag{78}$$

这正是时间无关散射问题中的 S-矩阵元,这就证明了 S-矩阵两种定义的等价性.

6. 绝热假设

从上面讨论的等价性看到,我们可以考虑一个比较简单的参考体系来代替"真实"的体系,而参考态 $|\Phi_a\rangle$ 与真实态 $|\Psi_a^\pm\rangle$ 间存在一一对应,使得散射截面等等可以通过相对于参考态定义的算符的矩阵元来计算. 下面我们更严格讨论这种处理方法的实质.

碰撞过程是一个真实入射态 $|\Psi_i^+\rangle$ 变成真实出射态 $|\Psi_f^-\rangle$ 的过程,即

$$|\Psi_i^+\rangle\rightarrow|\Psi_f^-\rangle \tag{79}$$

代替描述这种跃迁,我们可以把碰撞看作是引起相应参考体系的初态和末态之间的如下跃迁:

$$|\Phi_i\rangle\rightarrow|\Phi_f\rangle \tag{80}$$

现在我们来证明真实过程如何能被参考的模型过程(reference model process)所代替.

在时间相关散射的处理方法中,我们曾假定 $t=-\infty$ 时 $|\Phi(-\infty)\rangle=|\Phi_i\rangle$,经过无限长的时间后,我们有

$$|\Phi(+\infty)\rangle=S|\Phi_i\rangle \tag{81}$$

利用(51)式、(55)式、(44)式和(77)式,当(79)式表示的过程发生时,则有

$$|\Phi_i\rangle=U^{-1}(0,-\infty)|\Psi_i^+\rangle \qquad (\text{利用(51)式})$$

$$\rightarrow U^{-1}(0,-\infty)|\Psi_f^-\rangle \qquad \text{(利用(79)式)}$$
$$=U^{-1}(0,-\infty)U(0,+\infty)|\Phi_f\rangle \qquad \text{(利用(55)式)}$$
$$=U^{+}(0,-\infty)U(0,+\infty)|\Phi_f\rangle \qquad \text{(么正性)}$$
$$=U(-\infty,0)U(0,+\infty)|\Phi_f\rangle \qquad \text{(利用(44)式)}$$
$$=U(-\infty,+\infty)|\Phi_f\rangle \qquad \text{(利用(7)式)}$$
$$=S^{-1}|\Phi_f\rangle \qquad \text{(利用(77)式)}$$

即是

$$|\Phi_i\rangle \rightarrow S^{-1}|\Phi_f\rangle$$

或

$$S|\Phi_i\rangle \rightarrow |\Phi_f\rangle \tag{82}$$

由此可见，若有$|\Psi_i^+\rangle \rightarrow |\Psi_f^-\rangle$，则有$S|\Phi_i\rangle \rightarrow |\Phi_f\rangle$.

其次，我们来证明，真实过程(79)的跃迁几率与等价的模型过程(80)的跃迁几率相等.任意一个真实出射态可以写作

$$|\Psi^-\rangle = \sum_n c_n|\Psi_n^-\rangle \tag{83}$$

在$|\Psi^-\rangle$态中找到某个特殊末态$|\Psi_f^-\rangle$的几率为

$$|c_f|^2 = |\langle\Psi_f^-|\Psi^-\rangle|^2 \tag{84}$$

由于(60)式，上式可改写成

$$|c_f|^2 = |\langle\Phi_f|U(+\infty,0)|\Psi^-\rangle|^2 \tag{85}$$

另一方面，任意参考态$|\Phi\rangle$也可写成

$$|\Phi\rangle = \sum_n d_n|\Phi_n\rangle \tag{86}$$

在$|\Phi\rangle$态中找到某个特殊的参考态$|\Phi_f\rangle$的几率是

$$|d_f|^2 = |\langle\Phi_f|\Phi\rangle|^2 \tag{87}$$

如果没有束缚态存在，(60)式可以变成

$$|\Phi_n\rangle = U(+\infty,0)|\Psi_n^-\rangle$$

一般地有

$$|\Phi\rangle = U(+\infty,0)|\Psi^-\rangle$$

将上式代入(87)式，因而得到

$$|d_f|^2 = \left|\langle\Phi_f|U(+\infty,0)|\Psi^-\rangle\right|^2 \tag{88}$$

比较(85)式和(88)式，最后得到

$$|c_f|^2 = |d_f|^2 \tag{89}$$

这就是所需证明的对真实过程和模型过程具有相等的跃迁几率的

的结论.由此可见,确实可以用一个自由的参考体系去代替相互作用的真实体系.因为求解一个自由体系的方程总比求解非自由体系的方程容易得多,这是相互作用绘景的重要优点之一.

在上面的推导中,作了$|\Phi(-\infty)\rangle=|\Phi_i\rangle$的假设.我们现在来讨论这一假设的物理含义.让我们考虑从$t=-\infty$到$t=+\infty$全过程的各个环节.当我们断言在$t=-\infty$时态$|\Phi(-\infty)\rangle$就是参考体系的始态$|\Phi_i\rangle$,实际上就意味着在$t=-\infty$时相互作用H'可以看作是被关闭(switching off),并且$|\Phi(-\infty)\rangle$是H_0的本征态.然后我们想象相互作用逐渐地被引入(switching on),在引入过程中态的内部性质(能量、动量、自旋等)不改变(绝热引入).如果在$t=0$时获得H'的"全部强度"("full strength"),我们便有绝热过程(adiabatic process):

$$|\Phi(-\infty)\rangle\rightarrow|\Psi^+(0)\rangle\equiv U(0,-\infty)|\Phi(-\infty)\rangle \tag{90}$$

即在$t=0$时我们得到与参考体系$|\Phi(-\infty)\rangle$态具有相同性质的真实体系的入射态$|\Psi^+(0)\rangle$.然后,实际的碰撞过程在有限的时间间隔$t=0$到$t=t$内发生,即有

$$|\Psi^+(0)\rangle\rightarrow|\Psi^-(t)\rangle\equiv U(t,0)|\Psi^+(0)\rangle \tag{91}$$

即在$t=t$时刻我们得到真实的出射态.最后,我们想象在$t=t$到$t=+\infty$的时间内相互作用H'绝势地切除而不改变态的内部性质.所以,过程的最后一环是

$$|\Psi^-(t)\rangle\rightarrow|\Phi(+\infty)\rangle\equiv U(+\infty,t)|\Psi^-(t)\rangle \tag{92}$$

式中$|\Phi(+\infty)\rangle$是H_0是本征态.

由上可知,实际的散射过程发生在有限的时间间隔$t=0$到$t=t$内.莫勒算符$U(0,-\infty)$和$U(+\infty,t)$的作用分别是从参考体系的初态$|\Phi_i\rangle$得到真实的入射态$|\Psi^+(0)\rangle$和从真实的出射态$|\Psi^-(t)\rangle$得到参考体系的末态$|\Phi^+(\infty)\rangle$,这就是我们采用Gell-mann和Golldberger方法时,在$S=(+\infty,-\infty)$中振荡项不会引起麻烦的物理解释.事实上,从形式的观点看,我们可以说相互作用的绝热开关等价于利用"绝热相互作用"H'_{ad}来代替真实的相互作用H',即用

$$H'_{ad} \equiv e^{-\eta|t|}H'$$

代替 H'. 由此，可以产生"绝热的"U_{ad}，指数因子消除了所有的振荡. 在作完计算之后，取极限 $\eta \to +0$. 在实际计算中常常使用这种方法.

在相对论量子场论中，在 $t=-\infty$ 和 $t=+\infty$ 时"裸"粒子("bare particles")的假定明显地是一个理想化的假定，自作用(self-interactions)是永远不能被引入或切除的. 但是，绝热假说断言，我们可以想象，助籍于莫勒算符 $U(0,-\infty)$，H'的绝热引入使裸粒子周围附着虚量子云，即使裸粒子转变成为"物理"粒子("physical" particles). 碰撞过程则是在物理粒子或"穿衣服"的粒子("dressed" particles)之间发生的. 最后，当物理粒子再互相远离时，莫勒算符 $U(+\infty,t)$使它们失去附着的虚量子云，使物理粒子又转变为(想象的)出射"裸"粒子或"不穿衣服"的粒子("undressed" particles).

量子电动力学的成功给这种假说的应用提供了证据.

§6 传播子和格林函数算符

1. S-矩阵的图形表示

我们从 S-矩阵的标准形式(§4(5)式)

$$S_{fi} = \delta_{fi} - 2\pi i\delta(E_f - E_i)T_{fi} \tag{1}$$

出发. 它的级数展开表式(§5(31)式)为

$$S = S_0 + S_1 + S_2 + \cdots \tag{2}$$

其中，$S_0=1$，S_n 包含有相互作用的 n 次"幂". (1)式中 T-矩阵的玻恩级数表示为(§4(33)式)

$$T = H' + H'\frac{1}{E_i - H_0 + i\eta}H'$$

$$+ H'\frac{1}{E_i - H_0 + i\eta}H'\frac{1}{E_i - H_0 + i\eta}H' + \cdots \tag{3}$$

它的矩阵元为(§4(27)式)

$$T_{fi} = \langle\Phi_f|H'|\Phi_i\rangle + \langle\Phi_f|H'\frac{1}{E_i - H_0 + i\eta}H'|\Phi_i\rangle$$

$$+\langle\Phi_f|H'\frac{1}{E_i-H_0+i\eta}H'\frac{1}{E_i-H_0+i\eta}H'|\Phi_i\rangle+\cdots \quad (4)$$

用完全性关系$\sum_n|\Phi_n\rangle\langle\Phi_n|=1$及正交归一化条件$\langle\Phi_n|\Phi_m\rangle=\delta_{nm}$，可得

$$T_{fi}=\langle\Phi_f|H'|\Phi_i\rangle+$$
$$+\sum_{n,m}\langle\Phi_f|H'|\Phi_n\rangle\langle\Phi_n|\frac{1}{E_i-H_0+i\eta}|\Phi_m\rangle\langle\Phi_m|H'|\Phi_i\rangle+\cdots \quad (5)$$

将(5)式代入(1)式便得到

$$\left.\begin{aligned}&(S_0)_{fi}=\delta_{fi}\\&(S_1)_{fi}=-2\pi i\delta(E_f-E_i)\langle\Phi_f|H'|\Phi_i\rangle\\&(S_2)_{fi}=-2\pi i\delta(E_f-E_i)\sum_{n,m}\langle\Phi_f|H'|\Phi_n\rangle\\&\qquad\langle\Phi_n|\frac{1}{E_i-H_0+i\eta}|\Phi_m\rangle\langle\Phi_m|H'|\Phi_i\rangle\\&\quad\vdots\end{aligned}\right\} \quad (6)$$

以上各项可用简单的图形表示(graphical representation). 为此，我们规定下列规则：

(1) 用一条从右向左带箭头的线代表$|\Phi_i\rangle$，此线称为入射自由线(incoming free line)；

(2) 在入射自由线上用一黑点表示H'，此黑点称为顶点或顶角(vertex)；

(3) 用一条连结两个顶角的线代表算符

$$G_0^+(E_i)\equiv\sum_{n,m}|\Phi_n\rangle\langle\Phi_n|\frac{1}{E_i-H_0+i\eta}|\Phi_m\rangle\langle\Phi_m|$$
$$=\frac{1}{E_i-H_0+i\eta}$$

此线称为内部线(internal line)；

(4) 用一条从最后一个顶角指向左的带箭头的线代表$\langle\Phi_f|$，此线称为出射自由线(outgoing free line).

应用这些规则时要注意，我们读$(S_n)_{fi}$的数学公式时总是从最

右端开始顺序向左读出每一个因子，并相应地画出图形. 显然，上面的规则足以用图形表示 S 的矩阵元，并且是唯一的.

应用这些规则，我们可以用图形表示(2)式中每一个矩阵元，把相应的各个图形相加便可得到 S_{fi}的图形表示，如图8-6所示(为了简化，我们写 i 代表 $|\Phi_i\rangle$，f 代表 $\langle\Phi_f|$).

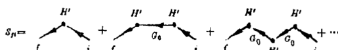


图 8-6

相反地，如果给出一个图形，按照上述规则，我们可以立刻写出相应的数学表示(当然，我们还必须添上因子 $-2\pi i\delta(E_f-E_i)$).

现在我们可以对 S-矩阵级数展开的每一项作图解诠释(pictorial interpretation). 从图8-6看到，一阶项简单诠译为自由入射粒子在顶角处发生散射而后变成出射的自由粒子. 二阶项可诠释如下：自由粒子 i 在第一个顶角处被散射，然后传播到第二个顶角处，再遭受另一次散射，最后变为末态自由粒子 f. 更高阶的项包含更多的内部传播.

用图形表示 S-矩阵的方法是费曼(Feynman)首先提出来的，因此，这样的图形称为费曼图(Feynman graph).

2. 自由传播子

由两个顶角之间传播线表示的数学因子是熟知的逆运算$(E_i-H_0+i\eta)^{-1}$. 因为它包含自由哈密顿量 H_0，从现在开始我们称 $G_0^+(E_i)$为自由传播子或自由传播函数(free propagator). 将自由传播子 G_0^+作付立叶变换便可表明这个新算符是造成态随时间演化的原因.

为此，考虑如下定义的算符 $G_0^+(t)$：

$$G_0^+(t)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}G_0^+(E)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\mathrm{d}E$$

$$=\frac{1}{2\pi\hbar}\lim_{\eta\to+0}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{E-H_0+i\eta}e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\mathrm{d}E \tag{7}$$

可以证明 $G_0^+(t)$ 满足下列方程：

$$\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+H_0\right)G_0^+(t)=-\delta(t) \tag{8}$$

证明如下. 因为 E,H_0 不是时间函数，故算符 $\frac{1}{E-H_0+i\eta}$ 与 $[-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+H_0]$ 对易，于是，(8)式左边为

$$\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+H_0\right)G_0^+(t)=$$

$$=\frac{1}{2\pi\hbar}\lim_{\eta\to+0}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{E-H_0+i\eta}(-E+H_0)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\mathrm{d}E$$

$$=\frac{1}{2\pi\hbar}\lim_{\eta\to+0}\int_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{1}{E-H_0+i\eta}-1\right]e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\mathrm{d}E$$

$$=-\delta(t)+\frac{1}{2\pi\hbar}\lim_{\eta\to+0}i\eta\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{-\frac{i}{\hbar}Et}}{E-H_0+i\eta}\mathrm{d}E$$

其中右边第二项可用回路积分方法求得(在复 E 下半平面及实轴围成回路)

$$\frac{1}{2\pi\hbar}\lim_{\eta\to+0}i\eta\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{-\frac{i}{\hbar}Et}}{E-H_0+i\eta}\mathrm{d}E=\lim_{\eta\to+0}\frac{i\eta}{2\pi\hbar}\cdot(2\pi i)e^{-\frac{i}{\hbar}(H_0-i\eta)t}=0$$

于是得证.

由于(8)式，我们称 $G_0^+(t)$ 为自由(未受微扰)薛定谔动力学方程的格林函数算符. 注意 $G_0^+(t)$ 不是普通的数，而是希尔伯特空间中的算符，它与表象无关，相对于某一特定的基取矩阵元，就得到相应的格林函数.

实际上，$G_0^+(t)$ 是推迟格林函数算符(retarded Green-function operator)

$$G_0^+(t)=0 \quad 对\ t<0 \tag{9}$$

这是因为(7)式积分时必须在复 E 平面的上半平面取闭合回路，如图8-7(a)所示. 这时由于 $+i\eta$ 的存在，被积表达式即算符 $(E-H_0+i\eta)^{-1}$ 在上半平面不存在极点，因而积分值为零.

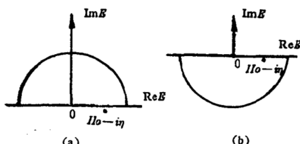


图 8-7

当 $t>0$时，积分回路必须如图8-7(b)那样选取，于是

$$G_0^+(t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \lim_{\eta\to+0} (2\pi i) e^{-\frac{i}{\hbar}(H_0 - i\eta)t}$$

$$= \frac{i}{\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t} \tag{10}$$

由(7)式的逆关系我们得到

$$G_0^+(E) = \int_{-\infty}^{\infty} G_0^+(t) e^{\frac{i}{\hbar}Et} \mathrm{d}t \tag{11}$$

这表明传播子 $G_0^+(E)$ 是时间格林函数算符(temporal Green-function operator)$G_0^+(t)$的付立叶变换.

为了解释 $G_0^+(t)$的物理意义，我们先证明遵守自由薛定谔动力学方程

$$\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial t_2} + H_0(t_2)\right] |\Phi(t_2)\rangle = 0 \tag{12}$$

的参考体系的态矢$|\Phi(t_2)\rangle$可表示为

$$|\Phi(t_2)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} G_0^+(t_2 - t_1 + \eta) |\Phi(t_1)\rangle \mathrm{d}t_1 \tag{13}$$

果然，由于(9)式，上式有效的积分上限应为 t_2，上式可改写成

$$|\Phi(t_2)\rangle = \lim_{\eta\to+0}\int_{-\infty}^{t_2} G_0^+(t_2 - t_1 + \eta) |\Phi(t_1)\rangle \mathrm{d}t_1$$

将上式代入(12)式左边并利用(8)式，我们得到

$$\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial t_2} + H_0(t_2)\right] |\Phi(t_2)\rangle =$$

$$= \left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial t_2} + H_0(t_2)\right] \lim_{\eta\to+0}\int_{-\infty}^{t_2} G_0^+(t_2 - t_1 + \eta) |\Phi(t_1)\rangle \mathrm{d}t_1$$

$$= \lim_{\eta \to +0} \int_{-\infty}^{t_2} [- i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} G_0^+ (t_2 - t_1 + \eta) + H_0(t_2) G_0^+ (t_2 - t_1 + \eta)] | \Phi(t_1) \rangle \mathrm{d}t_1$$

$$= - \lim_{\eta \to +0} \int_{-\infty}^{t_2} \delta(t_2 - t_1 + \eta) | \Phi(t_1) \rangle \mathrm{d}t_1 = 0$$

即证明了(13)式是(12)式的解. 由(13)式可见, 算符 $G_0^+(t_2-t_1+\eta)$ 的效应是引起自由态从 t_1到 t_2的时间传播, 由此, 可称它为自由体系(参考体系)的时间传播子. 更严格地说, 态的时间演化可以想象为以 $G_0^+(t_2-t_1+\eta)$为核(kernel)的积分变换. 而 $G_0^+(t)$的付立叶变换, 即 $G_0^+(E)$, 则称为"能量空间"的自由传播子, 或称为时间无关问题的格林函数算符.

3. 真实传播子

象上面一样, 先定义真实的(受微扰的)格林函数算符 $G^+(t)$, 它是完全薛定谔方程的算符解, 即 $G^+(t)$ 满足

$$(- i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + H_0 + H') G^+ (t) = - \delta(t) \tag{14}$$

及边界条件

$$G^+ (t) = 0 \quad 对 \, t < 0 \tag{15}$$

类似于自由传播子的方法, 可以证明, 遵守完全薛定谔方程

$$[- i\hbar \frac{\partial}{\partial t_2} + H_0(t_2) + H'(t_2)] | \Psi(t_2) \rangle = 0 \tag{16}$$

的真实体系的态矢 $|\Psi(t_2)\rangle$可表示为

$$|\Psi(t_2)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} G^+ (t_2 - t_1 + \eta) | \Psi(t_1) \rangle \mathrm{d}t_1 \tag{17}$$

这样, $G^+(t_2-t_1+\eta)$可以认为是真实时间传播子(true temporal propagator). 从(17)式可以看到, $G^+(t_2-t_1+\eta)$是在 $t=t_2$的态中发现特定态$|\Psi(t_1)\rangle$的几率振幅. 但这种说法有些肤浅, 因为 G^+是算符. 更严格地说, 在任意表象 ρ 中, 矩阵元$\langle \rho' | G^+(t_2-t_1+\eta) | \rho'' \rangle$给出在态函数$\langle \rho' | \Phi(t_2) \rangle$中发现态函数$\langle \rho'' | \Phi(t_1) \rangle$的几率振幅.

下面我们来找寻自由格林函数算符 $G_0^+(t)$与真实格林函数算符 $G^+(t)$之间的关系. 把(14)式改写成(以下省写 η):

$$[-i\hbar\frac{\partial}{\partial t_2}+H_0(t_2)]G^+(t_2-t_1)=$$

$$=-\delta(t_2-t_1)-H'(t_2)G^+(t_2-t_1)$$

$$=-\delta(t_2-t_1)-\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(t_3-t_2)H'(t_3)G^+(t_3-t_1)\mathrm{d}t_3 \quad (18)$$

若令$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t_2}+H_0(t_2)\equiv\hat{K}(t_2)$，$\hat{K}\hat{K}^{-1}=1$，则由上式可得

$$G^+(t_2-t_1)=\hat{K}^{-1}(t_2)[-\delta(t_2-t_1)$$

$$-\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(t_3-t_2)H'(t_3)G^+(t_3-t_1)\mathrm{d}t_3] \quad (19)$$

注意到(8)式，有

$$G_0^+(t_2-t_1)=-\hat{K}^{-1}(t_2)\delta(t_2-t_1)$$

于是(19)式成为

$$G^+(t_2-t_1)$$

$$=G_0^+(t_2-t_1)-\int_{-\infty}^{+\infty}\hat{K}^{-1}(t_2)\delta(t_3-t_2)H'(t_3)G^+(t_3-t_1)\mathrm{d}t_3$$

$$=G_0^+(t_2-t_1)+\int_{-\infty}^{+\infty}G_0^+(t_2-t_3)H'(t_3)G^+(t_3-t_1)\mathrm{d}t_3 \quad (20)$$

其中$t_2>t_3>t_1$.

现在我们用诺埃曼级数方法(迭代法)来求解这个非齐次费雷德霍姆积分方程，得到

$$G^+(t_2-t_1)$$

$$=G_0^+(t_2-t_1)+\int G_0^+(t_2-t_3)H'(t_3)G_0^+(t_3-t_1)\mathrm{d}t_3$$

$$+\iint G_0^+(t_2-t_3)H'(t_3)G_0^+(t_3-t_4)H'(t_4)G_0^+(t_4-t_1)\mathrm{d}t_3\mathrm{d}t_4 \quad (21)$$

式中积分限全部从$-\infty$到$+\infty$，但要注意，由于G_0^+的推迟性质，只当时间次序为

$$t_2>t_3>t_4>\cdots>t_1 \quad (22)$$

时积分才有贡献.

为了给出级数(21)式的图形表示，约定取时间增大的方向由下而上，t_i到t_{i+1}间的真实时间传播子用连结这两时刻的粗体直线表示，t_k到t_{k+1}间的自由传播子用连结这两时刻的细直线代表，相

互作用哈密顿量 $H'(t_n)$用直线上的结点(kink)表示，记上 t_n，并对 t_n 进行积分. 这样，诺埃曼-刘维级数(21)式用图形表示为图8-8.

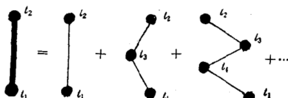


图 8-8

按照上面的约定，积分方程(20)式亦可用图形表示为图8-9.

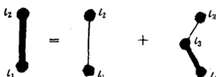


图 8-9

现在我们变换到"能量空间". 引入 $G^+(t)$的付立叶变换

$$G^+(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} G^+(t) e^{\frac{i}{\hbar}Et} dt \tag{23}$$

$G^+(E)$称为真实传播子(true propagator). 为了找到 $G^+(E)$的明显形式，取上式的逆变换

$$G^+(t) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} G^+(E) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} dE \tag{24}$$

将上式代入(14)式，得

$$G^+(E)(E - H_0 - H') = 1$$

由此得到

$$G^+(E) = \lim_{\eta\to+0} \frac{1}{E - H + i\eta} \tag{25}$$

其中 $H = H_0 + H'$，并在分母中加上了无穷小虚数部分 $i\eta$，以保证 $G^+(E)$有限，于是，(24)式便变成

$$G^+(t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \lim_{\eta\to+0} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{E - H + i\eta} e^{-\frac{i}{\hbar}Et} dE \tag{26}$$

且当 $t<0$时 $G^+(t) = 0$.

由 (23)式和(25)式可知，真实格林函数算符 $G^+(t)$的付立叶

变换 $G^+(E)$就是熟知的全逆算符 $\lim\limits_{\eta\to+0}(E-H+i\eta)^{-1}$（§3(30)式），因而称 $G^+(E)$为能量空间的真实传播子.

容易求得自由传播子 $G_0(E)$与真实传播子 $G^+(E)$之间的关系.取积分方程(20)式的付立叶变换得到

$$G^+(E)=G_0^+(E)+G_0^+(E)H'G^+(E) \tag{27}$$

上式不是新东西，而是§3(33)式，即§3(32)式的缩写，在那里是根据代数算符恒等式§3(31)式推导出来的.用迭代法便可得到代数的玻恩级数(algebraic Born series)：

$$\begin{aligned}G^+(E)=&G_0^+(E)+G_0^+(E)H'G_0^+(E)+\\&+G_0^+(E)H'G_0^+(E)H'G_0^+(E)+\cdots\end{aligned} \tag{28}$$

它就是§3(34)式的缩写.

算符方程(27)式和它的级数展开(28)式可以分别用图形表示为图8-10(a)和图8-10(b).

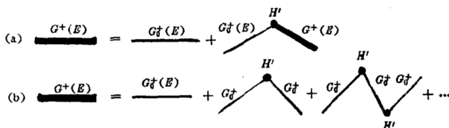


图 8-10

4. S-矩阵的闭合形式

现在我们回到 S-矩阵元 S_{fi}的展式.利用缩写 G_0^+代替自由传播子$(E_i-H_0+i\eta)^{-1}$，则(2)式和(6)式可表为

$$\begin{aligned}S_{fi}=&-2\pi i\delta(E_i-E_f)\{\langle\Phi_f|H'|\Phi_i\rangle+\\&+\sum_{n,m}\langle\Phi_f|H'|\Phi_n\rangle\langle\Phi_n|G_0^+|\Phi_m\rangle\langle\Phi_m|H'|\Phi_i\rangle+\cdots\}\end{aligned} \tag{29}$$

或

$$\begin{aligned}S_{fi}=&-2\pi i\delta(E_i-E_f)\{\langle\Phi_f|H'|\Phi_i\rangle+\\&+\langle\Phi_f|H'G_0^+H'|\Phi_i\rangle+\langle\Phi_f|H'G_0^+H'G_0^+H'|\Phi_i\rangle+\cdots\}\\=&-2\pi i\delta(E_i-E_f)\{\langle\Phi_f|H'|\Phi_i\rangle+\\&+\langle\Phi_f|H'(G_0^+ +G_0^+H'G_0+\cdots)H'|\Phi_i\rangle\}\end{aligned} \tag{30}$$

利用(28)式，最后得

$$S_{fi} = -2\pi i\delta(E_i - E_f)\{\langle\Phi_f|H'|\Phi_i\rangle + \langle\Phi_f|H'G^+(E_i)H'|\Phi_i\rangle\} \tag{31}$$

可见，利用真实传播子使我们能够把 S-矩阵表为闭合形式.

利用相同的约定，可以用图形表示 S-矩阵的闭合形式，如图8-11所示.

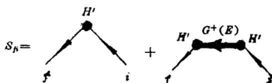


图 8-11

从形式上看，S-矩阵的这种闭合形式像二次近似，差别只在于前者用真实传播子代替了后者的自由传播子. 将图8-10代入图8-11便可得到 S-矩阵微扰级数的图形表示(图8-6). 图解方法(graph techniques)使我们能够得到复杂的解析关系.

第九章　相对论量子力学

薛定谔方程是量子力学的基本方程，可以把它看作是微观物理学的动力学规律，类似于经典的宏观物理学中的牛顿(Newton)运动方程. 应该指出，薛定谔方程是非相对论的，它只能描写速度远小于光速的粒子的运动. 按照薛定谔方程运动的粒子，几率(或粒子数)是守恒的，没有粒子的产生或消灭现象. 事实表明，对于描述原子与分子的绝大多数现象，甚至包括低能核物理的许多现象，薛定谔方程是相当成功的. 这是因为在上述问题中，粒子运动速度远小于光速，相对论效应很小，所以薛定谔方程是一个好的近似. 但一涉及高能领域，粒子产生与消灭就是一个普遍的现象，粒子数不一定守恒. 在这里，非相对论性的薛定谔方程就无能为力了.

从薛定谔方程的结构来看，其时间坐标与空间坐标处于不同等的地位

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\Psi \tag{1}$$

即波函数对时间坐标是一次微商，对空间坐标是二次微商，这种对时空坐标的不对称性说明薛定谔方程不满足相对论要求，即方程不具有洛仑兹不变性(Lorentz Invariance). 为了建立满足相对论不变性的方程，差不多与薛定谔方程提出的同时，薛定谔(1926年)、戈登(Gordon, 1926年)，克莱因(Klein, 1926年)等人建立了相对论性的波动方程(relativistic wave equation). 例如，在自由粒子的情况下，方程是

$$-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi = (-\hbar^2c^2\nabla^2 + m^2c^4)\Psi \tag{2}$$

习惯上称它为克莱因-戈登(Klein-Gordon)方程，或称薛定谔-戈登(Schrödinger-Gordon)方程，或称克莱因-福克(Klein-Fock)方程. 与

非相对论性的薛定谔方程明显不同，在 K-G 方程(2)中出现了波函数对时间坐标的二次导数，正如出现波函数对空间坐标的二次导数一样.

1926 年，狄喇克提出了电子的相对论性波动方程

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+i\hbar c\alpha\cdot\nabla-\beta mc^2\right)\Psi=0 \tag{3}$$

式中 α 与 β 是与坐标、动量无关的算符. 在这个方程中，波函数对时间坐标和空间坐标都是一次导数. K-G 方程(2)和狄喇克方程(3)都具有相对论协变性(relativistic covariance).

K-G 方程由于遇到了“负几率”的困难而被搁置 7 年之久未为人们所重视，而狄喇克方程除了满足相对论要求之外，还把粒子的自旋包含在方程之中，换句话说，电子的自旋和内禀磁矩乃是方程的必然结果；同时，它还能对氢原子光谱的精细结构给予满意的解释. 此外，狄喇克还预言了正电子的存在. 所以，狄喇克方程作为一个单电子方程所取得的成就是令人满意的.

直到 1934 年，泡利(Pauli)和韦斯科夫(Waisskopf)重新认识 K-G 方程，给它以新的解释：它不是一个单粒子的方程，而是一个场方程并对它进行量子化. 同样，狄喇克方程和电磁场的麦克斯韦方程都应为场方程. 这样，K-G 方程、狄喇克方程和麦克斯韦方程作为场方程分别称为标量场、旋量场和矢量场($m=0$)方程，将它们量子化后，分别描述自旋为 0、$\frac{\hbar}{2}$和 $\hbar$($m=0$)的粒子，例如 π 介子、电子和光子等等.

本章我们的讨论仍局限在单粒子波动方程的框架内，所以还不是彻底的相对论量子力学. 要进一步更细致地说明电子的反常磁矩和氢原子能级的兰姆(Lamb)位移，或处理粒子的产生和消灭现象，单粒子理论就不行了. 关于把场方程进行量子化，并用来说明高能领域中粒子的产生和消灭等现象的内容，读者可阅读有关量子场论的书籍.

§1 克莱因-戈登方程

1. 从薛定谔方程到 K-G 方程

在非相对论量子力学中，自由粒子的薛定谔方程可以从经典的能量动量关系式

$$E = \frac{p^2}{2m} \tag{4}$$

利用算符替换 $E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \quad p \to -i\hbar\nabla$ (5)

然后作用于波函数上得到

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(r,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(r,t) \tag{6}$$

从上式出发易证

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot j = 0 \tag{7}$$

其中 $\rho = \psi^*\psi \geqslant 0$ (8)

$$j = -\frac{i\hbar}{2m}(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*) \tag{9}$$

ρ 为粒子在空间的几率密度(probability density)，j 为几率流密度(probability current density)。(7)式叫连续性方程(continuity equation)，反映定域的几率守恒。

为得到满足相对论不变性要求的波动方程，人们注意到相对论的能量动量关系式

$$E^2 = c^2p^2 + m^2c^4 \tag{10}$$

利用算符替换(5)式并作用于波函数 $\Psi(r,t)$上，即得到

$$-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi = (-\hbar^2c^2\nabla^2 + m^2c^4)\Psi \tag{11}$$

或

$$\nabla^2\Psi - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} - \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\Psi = 0 \tag{11'}$$

这就是自由粒子的 K-G 方程。上式可简写成

$$(\Box - K^2) = 0 \tag{12}$$

式中 $$\square \equiv \nabla^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2},\quad K = \frac{mc}{\hbar} \tag{13}$$

亦可写成协变形式：

$$(\partial_\mu^2 - K^2)\Psi = 0 \tag{14}$$

式中，$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x_\mu}$，其中，$\partial_4 = \frac{\partial}{\partial x_4} = \frac{1}{ic}\frac{\partial}{\partial t}$，$\mu$ 从 1 到 4，重复下标表示从 1 到 4 求和.

2."负能量"与"负几率"困难

K-G 方程(11)将产生正能解和负能解.为看出这点，令

$$\Psi(\boldsymbol{r},t) = \psi(\boldsymbol{r})f(t) \tag{15}$$

代入(11)式可得 $$f(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E't} \tag{16}$$

式中 E' 是分离常数；而确定 ψ 的方程是

$$\nabla^2\psi + \frac{1}{c^2\hbar^2}E'^2\psi - \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\psi = 0 \tag{17}$$

上式对应于非相对论薛定谔能量方程 $H\psi = E'\psi$，最简单的平面波(plane wave)解是

$$\psi(\boldsymbol{r}) = e^{\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{18}$$

将上式代入(17)式得

$$-\frac{1}{\hbar^2}p'^2\psi + \frac{1}{c^2\hbar^2}E'^2\psi - \frac{m^2c^2}{h^2}\psi = 0$$

由此得到 $$E' = \pm c\sqrt{p'^2 + m^2c^2} \tag{19}$$

这里能量出现正负号，即出现了没有物理意义的"负能量"问题.无论是在经典力学领域，或是量子力学领域，都碰到"负能量"问题.但是在经典力学中，由于能量应连续变化，而观测到的粒子的初始能量总是正的($E \geqslant mc^2 > 0$)，所以以后任何时刻，能量保持

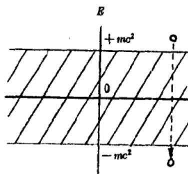


图 9-1

为正，不致引起麻烦. 但在量子力学中，粒子可以跃迁(图 9-1)，"负能级"便成了没有物理意义的困难.

与负能级联系在一起的还有"负几率"的困难. 与从非相对薛定谔方程得到连续性方程相似的步骤，可以得到

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \boldsymbol{j} = 0 \tag{20}$$

或写成协变形式：

$$\partial_\mu j_\mu = 0 \tag{21}$$

式中

$$\rho = \frac{i\hbar}{2mc^2}\left(\Psi^* \frac{\partial}{\partial t}\Psi - \Psi \frac{\partial}{\partial t}\Psi^*\right) \tag{22}$$

$$\boldsymbol{j} = \frac{-i\hbar}{2m}(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \tag{23}$$

$$j_\mu = (\boldsymbol{j}, ic\rho) \tag{24}$$

如果想把(22)式的 ρ 解释为粒子在空间的几率密度是有困难的，因为 ρ 不是正定的(positive definite). 这是由于 K-G 方程是时间的二阶微分方程，只当 $\Psi(\boldsymbol{r},0)$ 及 $\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r},t)\big|_{t=0}$ 都给定后，$\Psi(\boldsymbol{r},t)$ 才能确定，而初始条件 $\Psi(\boldsymbol{r},0)$ 及 $\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r},t)\big|_{t=0}$ 是可以任意给定的，这就有可能在空间一些区域中 $\rho(\boldsymbol{r},t)$ 为正而在另一些区域中为负，甚至在全部区域中都为负.

由于这些困难，K-G 方程被搁置七年之久. 1934 年，泡利和韦斯科夫把 K-G 方程解释为场方程，并把 $e\rho$ 和 $e\boldsymbol{j}$ 分别解释为电荷密度和电流密度，$e(\frac{\partial}{\partial t}\rho + \nabla \cdot \boldsymbol{j}) = 0$ 解释为电荷守恒定律(但粒子数不一定守恒). 由于 K-G 方程中波函数只有一个分量，它所描述的粒子是没有自旋的. 1947 年在实验上发现 π 介子(自旋为零)后，人们普遍用 K-G 方程来描述自由 π 介子场，以后又用来描述 K 介子等一类微观粒子的运动.

3. 非相对论极限

如果我们限于正能量的情形，那么在非相对论极限($\frac{v}{c} \ll 1$)情况下，粒子能量可近似地表为

$$E \simeq mc^2 + \frac{p^2}{2m} = mc^2 + E', \quad E' \ll mc^2 \tag{25}$$

其中第一项是粒子的静质量相应的静能量，第二项是动能. 令

$$\begin{aligned}\Psi(\boldsymbol{r},t) &= \psi(\boldsymbol{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \\ &= \psi(\boldsymbol{r})e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t}e^{-\frac{i}{\hbar}mc^2t} \\ &= \psi'(\boldsymbol{r},t)e^{-\frac{i}{\hbar}mc^2t}\end{aligned} \tag{26}$$

其中

$$\Psi'(\boldsymbol{r},t) = \psi(\boldsymbol{r})e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t} = \psi(\boldsymbol{r})e^{-\frac{i}{\hbar}E't} \tag{27}$$

是非相对论的定态波函数.

注意到(26)式，有

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = (i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi' + mc^2\Psi')e^{-\frac{i}{\hbar}mc^2t}$$

及 $$-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi)$$

$$= [-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi' + 2mc^2 i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi' + m^2c^4\Psi']e^{-\frac{i}{\hbar}mc^2t}$$

又由(27)式，有

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi' = \frac{p^2}{2m}\Psi' \ll mc^2\Psi'$$

$$-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi' = (\frac{p^2}{2m})^2\Psi'$$

但 $$2mc^2 i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi' = 2mc^2\frac{p^2}{2m}\Psi'$$

故 $$-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi' \ll 2mc^2 i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi'$$

于是得到

$$-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}\Psi \simeq [2mc^2 i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi' + m^2c^4\Psi']e^{-\frac{i}{\hbar}mc^2t}$$

再注意到

$$\nabla^2\Psi = \nabla^2\Psi' e^{-\frac{i}{\hbar}mc^2t}$$

将以上诸式代入(11′)式便得到

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi' = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi' \tag{28}$$

这就是非相对论情况下自由粒子的薛定谔方程.可见,在非相对论极限下,K-G方程过渡到薛定谔方程.

此外,还可证明,当把(26)式代入(22)式并注意到(27)式,可得到

$$\rho(\boldsymbol{r},t) = \Psi'^*\Psi' = \Psi^*\Psi \geqslant 0 \tag{29}$$

这时 ρ 是正定的,并可把 ρ 理解为几率密度.

§2 狄喇克方程

1.狄喇克方程的建立

为了避免K-G方程所带来的负几率困难,狄喇克于1926年建立了电子的相对论波动方程.狄喇克认为满足相对论要求的波动方程应该是时间 t 和空间坐标 $\boldsymbol{r}$ 的一阶微分方程,这样可使方程时空坐标具有对称的特性,又可避免几率密度表式中出现$\frac{\partial\Psi}{\partial t}$.此外,参照非相对论量子力学中泡利的二分量自旋理论,考虑到电子除了平动之外还有新的自由度——自旋,因此他提出电子的波函数应为多分量波函数,即

$$\Psi_\sigma(\boldsymbol{r},t), \quad \sigma = 1,2,\cdots,N \tag{1}$$

这样才能在非相对论极限下过渡为泡利理论.

为了方便,多分量波函数 $\Psi_\sigma(\boldsymbol{r},t)$ 可写成列矢的形式:

$$\Psi = \begin{bmatrix} \Psi_1(\boldsymbol{r},t) \\ \Psi_2(\boldsymbol{r},t) \\ \vdots \\ \Psi_N(\boldsymbol{r},t) \end{bmatrix} \tag{2}$$

而其复共轭转置则表为行矢形式:

$$\Psi^+ = (\Psi_1^*(\boldsymbol{r},t), \Psi_2^*(\boldsymbol{r},t), \cdots, \Psi_N^*(\boldsymbol{r},t)) \tag{3}$$

电子在空间的几率密度若定义为

$$\rho(\boldsymbol{r},t) = \Psi^+(\boldsymbol{r},t)\Psi(\boldsymbol{r},t)$$

$$= \sum_{\sigma=1}^{N} \Psi_\sigma^*(\mathbf{r},t)\Psi_\sigma(\mathbf{r},t) \tag{4}$$

则 ρ 必满足正定条件.

为了得到对时空坐标的一阶微分方程,将相对论的能量动量关系式 $E^2=c^2\mathbf{p}^2+m^2c^4$ 两边开方:

$$E = \sqrt{c^2\mathbf{p}^2 + m^2c^4} \tag{5}$$

但是,上式右端是非线性的,不满足量子力学中算符为线性算符的要求.狄喇克假定(5)式右端可以写成如下线性形式:

$$E = \sqrt{c^2\mathbf{p}^2 + m^2c^4} = c\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{p} + \beta mc^2 \tag{6}$$

其中 α 和 β 是与坐标、动量无关的算符.我们把(6)式右端看作是自由电子的哈密顿算符:

$$H = c\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{p} + \beta mc^2 \tag{7}$$

利用算符替换 $E\to i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}$,$\mathbf{p}\to -i\hbar\nabla$,并作用到波函数上,便得到自由电子的狄喇克方程

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + i\hbar c\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla - \beta mc^2\right)\Psi = 0 \tag{8}$$

或

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = H\Psi \tag{9}$$

其中 H 由(7)式给出.由上式看到,狄喇克方程与非相对论薛定谔方程具有相同的形式,但其中 H 当然大不相同.

2.算符 α 和 β 的代数性质

将(6)式平方便有

$$(\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{p} + \beta mc)(\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{p} + \beta mc) = \mathbf{p}^2 + m^2c^2$$

即

$$(\alpha_i p_i + \beta mc)(\alpha_i p_i + \beta mc) = p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 + m^2c^2$$

将上式展开得

$$\begin{aligned}&\alpha_1^2p_1^2 + \alpha_2^2p_2^2 + \alpha_3^2p_3^2 + \beta^2m^2c^2\\ &\quad + (\alpha_1\alpha_2 + \alpha_2\alpha_1)p_1p_2 + \cdots + \cdots\\ &\quad + (\alpha_1\beta + \beta\alpha_1)p_1mc + \cdots + = p_1^2 + p_2^2 + p_3^2 + m^2c^2\end{aligned}$$

为使上式两边恒等,必须服从如下的代数关系:

$$
\left.\begin{array}{l}
\alpha_1^2 = \alpha_2^2 = \alpha_3^2 = \beta^2 = 1 \\
\alpha_i\alpha_k + \alpha_k\alpha_i = 0, \quad i,k = 1,2,3, i \neq k \\
\alpha_i\beta + \beta\alpha_i = 0, \quad i = 1,2,3
\end{array}\right\} \tag{10}
$$

或写成

$$
\left.\begin{array}{l}
\beta^2 = 1 \\
\alpha_i\alpha_k + \alpha_k\alpha_i = 2\delta_{ik}, \quad i,k = 1,2,3 \\
\alpha_i\beta + \beta\alpha_i = 0, \quad i = 1,2,3
\end{array}\right\} \tag{11}
$$

由上两式可见，α_1(即 α_x)，α_2(即 α_y)，α_3(即 α_z)及 β 是四个相互反对易(anticommutation)的算符. 它们的平方和都等于 1，因而它们的本征值是 ± 1.

3. α 与 β 的矩阵表示

算符 $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z, \beta$ 在一定的表象中可以用矩阵表示.

因为 H 是厄密算符，所以 $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z, \beta$ 都必须是厄密算符，即

$$
\alpha_x^+ = \alpha_x, \quad \alpha_y^+ = \alpha_y, \quad \alpha_z^+ = \alpha_z, \quad \beta^+ = \beta. \tag{12}
$$

因此，它们的矩阵必然是正方矩阵. 由于这些相互反对易的算符的本征值是 ± 1，可以证明它们的矩阵的维数不能是奇数，只能是偶数. 由(10)式有

$$
\beta\alpha_i = -\alpha_i\beta = (-E)\alpha_i\beta
$$

式中 E 为 $N \times N$ 单位矩阵，取上式两边的矩阵所对应的行列式值，得

$$
\det\beta \cdot \det\alpha_i = \det(-E) \cdot \det\alpha_i \cdot \det\beta
$$

但是，$\det(-E) = (-1)^N$，上式化为

$$
(-1)^N = 1
$$

因而

$$
N = 偶数
$$

2×2 矩阵有 4 个是线性无关的，例如，泡利矩阵

$$
\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{13}
$$

及 2×2 单位矩阵

$$
E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{14}
$$

它们构成 4 个线性无关的 2×2 矩阵. 虽然 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ 是相互反对易的,但 E 是单位矩阵,与任何矩阵都对易. 因此找不到 4 个线性无关的彼此反对易的 2×2 厄密矩阵,所以狄喇克方程中的 α 与 β 不能表成 2×2 矩阵.

我们尝试用 4 阶方矩阵来表示这些算符,但它们的 4×4 矩阵表示不是唯一的. 通常惯用的是泡利-狄喇克表象(Pauli-Dirac representation),在这个表象中,β 是对角化的. 由于 β 的本征值为 ± 1,故可取

$$\beta = \begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & -E \end{pmatrix} \tag{15}$$

其中 E 为(14)式,$0=\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$是 2×2 零矩阵,即

$$\beta = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{16}$$

容易证明,α 可用泡利矩阵 $\boldsymbol{\sigma}$ 来表示,即

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \tag{17}$$

或

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix}, \quad i = x, y, z \tag{18}$$

其中 σ_i 由(13)式给出. 上式亦可明显地写为

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{19}$$

4.连续性方程

由于 α 与 β 用 4×4 矩阵表示,故狄喇克方程(8)式中的 $\psi(\boldsymbol{r},t)$也要用四行一列矩阵

$$\Psi(\boldsymbol{r},t) = \begin{pmatrix} \Psi_1(\boldsymbol{r},t) \\ \Psi_2(\boldsymbol{r},t) \\ \Psi_3(\boldsymbol{r},t) \\ \Psi_4(\boldsymbol{r},t) \end{pmatrix} \tag{20}$$

表示,而其厄米密轭 $\Psi^+(\boldsymbol{r},t)$则用一行四列矩阵表示

$$\Psi^+(\boldsymbol{r},t) = (\Psi_1^*(\boldsymbol{r},t),\Psi_2^*(\boldsymbol{r},t),\Psi_3^*(\boldsymbol{r},t),\Psi_4^*(\boldsymbol{r},t)) \tag{21}$$

因此,当 α 与 β 作用在 Ψ^+上时,必须写在 Ψ^+的右边.

为求几率流密度,我们首先写出狄喇克方程(8)式的共轭方程

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi^+ - \hbar ic\nabla\Psi^+\cdot\boldsymbol{\alpha} - \Psi^+\beta mc^2 = 0 \tag{22}$$

以 Ψ^+左乘(8)式,以 Ψ 右乘(22)式,然后相减得

$$i\hbar\left\{\frac{\partial}{\partial t}\Psi^+\Psi + c\nabla\cdot(\Psi^+\boldsymbol{\alpha}\Psi)\right\} = 0 \tag{23}$$

令

$$\rho = \Psi^+\Psi \tag{24}$$

$$\boldsymbol{J} = c\Psi^+\boldsymbol{\alpha}\Psi \tag{25}$$

则得连续性方程

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla\cdot\boldsymbol{J} = 0 \tag{26}$$

(24)式定义的 ρ 显然是正定的,故在单粒子理论中可把 ρ 解释为几率密度,而(25)式定义的 $\boldsymbol{J}$ 则为几率流密度.

5.狄喇克方程的协变形式

为了便于相对论计算,我们将狄喇克方程写成协变形式.在相对论量子场论中,常用自然单位制,取 $c=\hbar=1$.用 $-\beta$ 乘(8)式得

$$(\beta\frac{\partial}{i\partial t} - i\beta\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla + m)\Psi = 0 \tag{27}$$

令

$$\left.\begin{aligned}\gamma_j &= -i\beta\alpha_j, \quad j = 1,2,3 \\ \gamma_4 &= \beta\end{aligned}\right\} \tag{28}$$

则(27)式可变为完全对称的形式

$$(\gamma_\mu\partial_\mu + m)\Psi = 0 \tag{29}$$

这就是狄喇克方程的协变形式(covariant form). 利用 α 和 β 的代数性质(10)式,则(28)式引进的算符 γ_μ 应满足如下代数关系

$$\left.\begin{aligned}&\gamma_\mu^2 = 1, \quad \mu = 1,2,3,4 \\ &\gamma_\mu\gamma_\nu + \gamma_\nu\gamma_\mu = 0, \quad \mu \neq \nu \quad \mu,\nu = 1,2,3,4\end{aligned}\right\} \tag{30}$$

或结合为一个关系:

$$\gamma_\mu\gamma_\nu + \gamma_\nu\gamma_\mu = 2\delta_{\mu\nu}, \quad \mu,\nu = 1,2,3,4 \tag{31}$$

γ_μ 称为狄喇克算符. 在泡利—狄喇克表象中, γ_μ 可表为

$$\gamma_j = \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_j \\ i\sigma_j & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_4 = \begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & -E \end{pmatrix} \tag{32}$$

即

$$\left.\begin{aligned}\gamma_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \gamma_3 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}\end{aligned}\right\} \tag{33}$$

称为狄喇克矩阵或 γ-矩阵(Gamma matrices).

由(33)式看出, γ-矩阵是厄密矩阵. 诚然,我们也可从 α、β 的厄密性 $\alpha_j^+ = \alpha_j, \beta^+ = \beta$ 证明 γ_μ 的厄密性

$$\gamma_\mu^+ = \gamma_\mu \tag{34}$$

狄喇克方程的厄密共轭方程是

$$\partial_j\Psi^+\gamma_j - \partial_4\Psi^+\gamma_4 + m\Psi^+ = 0 \tag{35}$$

引进相伴波函数或相伴旋量(adjoint spinor)

$$\bar{\Psi} = \Psi^{+} \gamma_4 \tag{36}$$

其矩阵表示为

$$\bar{\Psi} = (\Psi_1^*, \Psi_2^*, -\Psi_3^*, -\Psi_3^*), \tag{37}$$

于是(35)式可化为

$$(\partial_\mu \bar{\Psi} \gamma_\mu - m\bar{\Psi}) = 0 \tag{38}$$

上式称为狄喇克方程的相伴方程(adjoint equation).

至于狄喇克方程的协变性的证明,见§8.

§3 电子的自旋角动量

在非相对论量子力学中,电子的自旋是基于一些实验事实,把自旋看成第四个自由度而附加进去的. 现在我们从狄喇克方程出发,可以很自然地得出电子具有自旋角动量.

为此,研究电子在库仑中心力场中的运动. 这时,势能 $V(r) = e\varphi(r)$,于是,哈密顿量 H 是

$$H = c(\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{p}) + mc^2\beta + e\varphi(r) \tag{1}$$

我们知道,在中心力场中,由于旋转对称性,电子的总角动量 $\boldsymbol{J}$ 是守恒量. 但可以证明,电子的轨道角动量 $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$ 并不是守恒量. 例如

$$\begin{aligned} [L_x, H] &= [L_x, c(\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{p}) + mc^2\beta + e\varphi(r)] \\ &= c[L_x, \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{p}] \\ &= i\hbar c(\alpha_y p_z - \alpha_z p_y) \neq 0 \end{aligned} \tag{2}$$

其它分量可同样进行计算. 可见轨道的动量的三个分量都不是守恒量. 由于总角动量守恒,因此,必定存在一种内禀的角动量,使得总角动量守恒.

为寻求这一内禀角动量,我们作一个四阶方阵 Σ:

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \tag{3}$$

或
$$\Sigma_j = \begin{pmatrix} \sigma_j & 0 \\ 0 & \sigma_j \end{pmatrix}, \quad j = x, y, z \tag{4}$$

不难证明

$$[\Sigma_j, \beta] = 0, \quad [\Sigma_j, \alpha_j] = 0, \quad j = x, y, z \tag{5}$$

$$[\Sigma_x, \alpha_y] = 2i\alpha_z, \quad [\Sigma_x, \alpha_z] = -2i\alpha_y, \cdots \tag{6}$$

于是可求

$$\begin{aligned} [\Sigma_x, H] &= [\Sigma_x, c(\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{p}) + mc^2\beta + e\varphi(r)] \\ &= c[\Sigma_x, \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{p}] \\ &= -i2c(\alpha_y p_z - \alpha_z p_y) \neq 0 \end{aligned} \tag{7}$$

若令

$$J_x = L_x + \frac{h}{2}\Sigma_x \tag{8}$$

则由(2)式和(7)式可得

$$[J_x, H] = 0 \tag{9a}$$

对其它分量亦可得到相同的对易关系：

$$[J_y, H] = 0 \tag{9b}$$

$$[J_z, H] = 0 \tag{9c}$$

于是有
$$[\boldsymbol{J}, H] = 0 \tag{10}$$

式中
$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Sigma} \tag{11}$$

由此得出结论，必须存在内禀角动量$\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Sigma}$，才能保证电子总角动量守恒．引进算符

$$\boldsymbol{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Sigma} \tag{12}$$

称为电子的自旋角动量算符．这样，电子的自旋性质能自然地从考虑了相对论效应的狄喇克方程得出，而不再作为假设引进到量子力学中．

下面我们引入有关算符 $\boldsymbol{\sigma}$、$\boldsymbol{\alpha}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的运算公式，以备查用．

$$\left.\begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{B}) &= \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{B}) \\ (\boldsymbol{\Sigma} \cdot \boldsymbol{A})(\boldsymbol{\Sigma} \cdot \boldsymbol{B}) &= \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B} + i\boldsymbol{\Sigma} \cdot (\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{B}) \end{aligned}\right\}$$

$$\left.\begin{aligned}(\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathrm{A})(\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{B}) &= \mathbf{A}\cdot\mathbf{B}+i\boldsymbol{\Sigma}\cdot(\mathbf{A}\times\mathbf{B})\\ (\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathrm{A})(\boldsymbol{\Sigma}\cdot\mathbf{B}) &= (\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{B})\\ &= -\gamma_5(\boldsymbol{A}\cdot\mathbf{B})+i\boldsymbol{\alpha}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\end{aligned}\right\} \tag{13}$$

式中
$$\gamma_5=\begin{pmatrix}0 & -E\\ -E & 0\end{pmatrix} \tag{14}$$

而 $\boldsymbol{A}$、$\boldsymbol{B}$ 是与 σ 对易的任何两个矢量算符.

§4　自由电子的平面波解

1. 平面波解

我们首先证明,自由电子的动量是守恒量. 由于 $\boldsymbol{\alpha}$、β 与坐标、动量无关,有

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{p},H] &= [\boldsymbol{p},c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+mc^2\beta]\\ &= c[\boldsymbol{p},\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}]+mc^2[\boldsymbol{p},\beta]=0\end{aligned} \tag{1}$$

故自由电子的动量是守恒量,自由电子的能量自然也是守恒量. 因此,它们有共同的本征态. 平面波形式的解

$$\Psi_{\boldsymbol{p},E}(\boldsymbol{r},t)=u(\boldsymbol{p})e^{-\frac{i}{\hbar}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}-Et)} \tag{2}$$

就是自由电子动量和能量的共同本征函数. 由于 Ψ 是四行一列矩阵,故 $u(\boldsymbol{p})$ 也是四行一列矩阵

$$u(\boldsymbol{p})=\begin{bmatrix}u_1(\boldsymbol{p})\\ u_2(\boldsymbol{p})\\ u_3(\boldsymbol{p})\\ u_4(\boldsymbol{p})\end{bmatrix} \tag{3}$$

现将(2)式代入狄喇克方程 §2(8)式,得到 $u(\boldsymbol{p})$ 满足的方程

$$(c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+mc^2\beta)u=Eu \tag{4}$$

为简便,取电子动量方向沿 z 轴方向,动量值记为 p,采用泡利-狄喇克表象,将 §2(16)、(19)式及本节(3)式代入上式,得

$$
\begin{pmatrix} 0 & 0 & cp & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -cp \\ cp & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -cp & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} + mc^2\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix}
$$

$$
= E\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} \tag{5}
$$

由此得联立方程组

$$
(mc^2 - E)u_1 + cpu_3 = 0 \tag{6a}
$$

$$
cpu_1 - (mc^2 + E)u_3 = 0 \tag{6b}
$$

$$
(mc^2 - E)u_2 - cpu_4 = 0 \tag{6c}
$$

$$
- cpu_2 - (mc^2 + E)u_4 = 0 \tag{6d}
$$

(6a)与(6b)是 u_1 与 u_3 的联立方程组,(6c)与(6d)是 u_2 与 u_4 的联立方程组,它们有非零解的条件是系数行列式为零,即

$$
\begin{vmatrix} mc^2 - E & cp \\ cp & -(mc^2 + E) \end{vmatrix} = 0 \tag{7}
$$

由此可解出 E 的两个根为

$$
E = E_{\pm} = \pm \sqrt{m^2c^4 + c^2p^2} = \pm |E| \tag{8}
$$

由此可见,服从狄喇克方程的自由电子,即使动量确定之后,能量并不完全确定,可以取 $+|E|$,也可以取 $-|E|$(负能量),而且,即使动量和能量都确定后,能级仍然是二重简并的(二重根),故仍不能完全确定状态(波函数).事实上,如把 $E=E_+$ 分别代入(6b)和(6d)式,可求出

$$
\left.\begin{aligned} u_3 &= \frac{cp}{mc^2 + E_+}u_1, \\ u_4 &= \frac{-cp}{mc^2 + E_+}u_2 \end{aligned}\right\} \tag{9}
$$

可见,还不能把解全部确定下来.要将状态完全确定,需要再找一个守恒量(好量子数)与 $\boldsymbol{p}$、H 都对易,以构成力学量的完全集.通

常选为总角动量或螺旋性(helicity).

螺旋性算符定义为

$$\boldsymbol{\Sigma}\cdot\frac{\boldsymbol{p}}{|\boldsymbol{p}|}=\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{e},\quad \boldsymbol{e}=\frac{\boldsymbol{p}}{|\boldsymbol{p}|} \tag{10}$$

其物理意义可理解为粒子自旋在动量方向上的投影.

可以证明

$$[\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{e},H]=0,\quad [\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{e},\boldsymbol{p}]=0 \tag{11}$$

$$(\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{e})^2=1 \tag{12}$$

可见,$\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{e}$ 是与 $\boldsymbol{p}$、H 均对易的守恒量,其本征值为±1. 所以,我们可以选$(\boldsymbol{p},H,\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{e})$. 作为力学量的完全集,求其共同本征态,即要求 u 是 Σ_z 的本征态

$$\Sigma_z\begin{pmatrix}u_1\\u_2\\u_3\\u_4\end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix}u_1\\u_2\\u_3\\u_4\end{pmatrix} \tag{13}$$

即

$$\begin{pmatrix}1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}u_1\\u_2\\u_3\\u_4\end{pmatrix}=\lambda\begin{pmatrix}u_1\\u_2\\u_3\\u_4\end{pmatrix} \tag{14}$$

由此得到

$$\begin{aligned}u_1&=\lambda u_1,\\-u_2&=\lambda u_2\\u_3&=\lambda u_3,\\-u_4&=\lambda u_4\end{aligned}$$

对于

$$\lambda=+1,\quad u_2=u_4=0,$$

$$\lambda=-1,\quad u_1=u_3=0$$

注意到(9)式,对于 $E=E_+$,有如下两组解:

$$u^{(1)} \sim \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \dfrac{cp}{mc^2 + E_+} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \lambda = +1$$

$$u^{(2)} \sim \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \dfrac{-cp}{mc^2 + E_+} \end{bmatrix}, \quad \lambda = -1$$

对于负能量解 $E=E_-$也有相应的结果.

可见,同一能量对应的两个状态可由螺旋性算符的本征值来区分. 这样,具有确定能量的自由电子,狄喇克方程应有 4 个线性独立的解答,分别由 $E=\pm\sqrt{c^2p^2+m^2c^4}$及 $\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{e}=1$ 来标记,它们是:

$$\left.\begin{aligned}
u^{(1)} &= N\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \dfrac{cp}{mc^2 + E_+} \\ 0 \end{bmatrix}, E = E_+, \Sigma_z = 1, s_z = \frac{\hbar}{2}(\uparrow) \\
u^{(2)} &= N\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \dfrac{-cp}{mc^2 + E_+} \end{bmatrix}, E = E_+, \Sigma_z = -1, s_z = -\frac{\hbar}{2}(\downarrow) \\
u^{(3)} &= N\begin{bmatrix} \dfrac{-cp}{mc^2 - E_-} \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, E = E_-, \Sigma_z = 1, s_z = \frac{\hbar}{2}(\uparrow)
\end{aligned}\right\}$$

$$u^{(4)} = N\begin{bmatrix} 0 \\ \dfrac{cp}{mc^2 - E_-} \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, E = E_-, \Sigma_z = -1, s_z = -\frac{\hbar}{2}(\downarrow) \tag{15}$$

式中 N 是归一化常数：

$$N = \left[1 + \frac{c^2p^2}{mc^2 + |E|^2}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{16}$$

在非相对论极限($\frac{v}{c} \to 0$)情况下，(15)式趋于

$$u^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad u^{(2)} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad u^{(3)} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad u^{(4)} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

2. 空穴理论

在上述狄喇克方程的解中，自由电子可以处于正能态，也可处于负能态. 这种负能解的存在，曾经是狄喇克电子理论中的一个严重困难. 因为这里的负能量同以往非相对论中所遇到的负能量有所不同. 例如在中心力场中运动的电子，其负能量是由于势能起点的选择而产生的，而这里的负能量是由爱因斯坦质能关系所规定的总能量，这样的负能量就表示粒子的质量是负的. 这是不可想象的.

另外，负能态的存在将不能解释物质世界的稳定性. 因为对于正能态，能量 E_+

$$mc^2 \leqslant E_+ < +\infty$$

而对于负能态，能量 E_-

$$-\infty < E_- \leqslant -mc^2$$

如图9-1所示. 由于负能态的存在，并且负能级可以伸延到无穷远处，这将引起正能态的电子不断地无止境地向更负的能态跃迁而放出能量，粒子便不能处于稳定的状态.

为了克服负能量的困难，狄喇克于1930年提出过“空穴”理论(hole theory). 他假定在真空状态下，所有负能态都被电子填满(电子海 electron sea). 由于泡利不相容原理，在真空中运动的正能量电子便不允许跃迁到负能态上去. 电子海只起着背景作用，电子海中的电子的能量和动量是不能观测的. 只有从电子海中移去一个或多个电子时，才能产生可观测效应. 当外界激发时，例如能量 $E \geqslant 2mc^2$ 的 γ 射线的作用下，电子海中有一个负能态的电子被激发到正能态，负能态中便减少了一个能量为 E_-，质量为 $-m$、电荷为 $-e<0$ 的电子，因而电子海中便出现一个“空穴”，它具有能量 E_+，质量为 m，电荷为 $+e>0$. 可见，空穴与正能态电子具有相同的正能量和质量，只是电荷符号不同，故空穴可理解为电子的反粒子，即“正电子”(positron). 1932 年安德逊(Anderson)在宇宙射线中观测到正电子，证实了狄喇克的预见.

狄喇克的空穴理论，预言了正电子的存在，克服了正能态电子跃迁到负能态的困难，并且可以解释电子——正电子偶(electron-positron pair)的产生(creation)和消灭(annihilation)现象. 然而，空穴理论并不是完满的理论，它是违反客观事实的. 实际上没有电子的真实状态被看成是充满无穷多个负能态电子而又不可观测，这是荒谬的. 实际上，只有把波动方程解释为场方程并进行量子化以后才能克服负能困难，在量子场论中可以很好地解释电子——正电子偶的产生和湮没现象，而无须求助于空穴理论.

§5 电子在电磁场中运动 • 自旋磁矩

象电子的自旋角动量一样，电子的自旋磁矩也可以从狄喇克方程自然地得出. 为此，我们先考虑电子在电磁场中的运动，建立电子在电磁场中运动的狄喇克方程.

电子带电荷 $-e$，它在电磁场 $(\boldsymbol{A}, \varphi)$ 中的运动方程，可以在自由粒子方程 §2(8)式中作如下替换得出：

$$
\left.\begin{array}{l}
E \to E + e\varphi \\
p \to p + \dfrac{e}{c}A, \quad p \text{ 为正则动量}
\end{array}\right\} \tag{1}
$$

于是，我们得到电子在电磁场中运动的方程

$$
\left[E + e\varphi - c\boldsymbol{\alpha} \cdot \left(p + \frac{e}{c}A\right) - mc^2\beta\right]\Psi = 0 \tag{2}
$$

式中 E 和 p 是算符，由 § 1(5)式表示. 上式亦可写成

$$
\left[\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + e\varphi\right) - \boldsymbol{\alpha} \cdot (cp + eA) - mc^2\beta\right]\Psi = 0 \tag{3}
$$

利用 § 3(13)式中的公式

$$
(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{A})(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{A}) = (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) + i\boldsymbol{\Sigma} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B})
$$

可将(3)式化为①

$$
\begin{aligned}
&\left[\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + e\varphi\right)^2 - (cp + e\mathbf{A})^2 - m^2c^4\right. \\
&\left. - e\hbar c\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{B} + ie\hbar c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{E}\right]\Psi = 0
\end{aligned} \tag{4}
$$

式中 $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \mathbf{E} = -\dfrac{1}{c}\dfrac{\partial}{\partial t}\mathbf{A} - \nabla\varphi$.

在非相对论极限下，上式过渡为泡利方程. 事实上，令

$$
\left.\begin{array}{l}
\Psi = \Psi' e^{-\frac{i}{\hbar}mc^2 t} \\
E = E' + mc^2
\end{array}\right\} \tag{5}
$$

在非相对论极限情形下，$E' \ll mc^2, e\varphi \ll mc^2$，则有

$$
\begin{aligned}
\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + e\varphi\right)\Psi &= \left[\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + e\varphi\right)\Psi' + mc^2\Psi'\right]e^{-\frac{i}{\hbar}mc^2 t}, \\
\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + e\varphi\right)^2\Psi &= \left\{\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + e\varphi\right)^2\Psi' + mc^2\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + e\varphi\right)\Psi'\right. \\
&\quad \left. + mc^2\left[\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + e\varphi\right)\Psi' + mc^2\Psi'\right]\right\}e^{-\frac{i}{\hbar}mc^2 t}, \\
&\simeq \left\{\left[m^2c^4 + 2mc^2\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + e\varphi\right)\right]\Psi'\right\}e^{-\frac{i}{\hbar}mc^2 t}
\end{aligned}
$$

代入(4)式，并忽略(4)式中最后一项(在非相对论极限下，该项很

---

① 例如可参阅曾谨言编著，量子力学，下册，P. 586.

小),得到

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi' = \left[\frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 - e\varphi + \frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{B}\right]\Psi' \qquad (6)$$

这就是电子在电磁场中运动的泡利方程. 右边最后一项$\frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{B}$是电子的内禀磁矩与磁场的作用能量. 内禀磁矩算符为

$$\mu = -\frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\Sigma} \qquad (7)$$

其数值为玻尔磁子(Bohr magneton)μ_B:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} \qquad (8)$$

由上可知,电子具有内禀磁矩值 μ_B 是狄喇克方程的一个重要结果,这与实验观测值很相近. 精细的实验观测值为

$$\mu = 1.00116\mu_B$$

所以,一方面狄喇克的相对论量子力学能够对电子的自旋磁矩给予较满意的解释,但另一方面观测值与玻尔磁子还有微小差异($\sim\frac{1}{1000}$),其原因是由于电子具有反常磁矩(anomalous megnetic moment),它是作为单电子理论的狄喇克的相对论量子力学所无法解释的. 量子电动力学的计算能够很好地说明电子的反常磁矩.

§6 自旋与轨道耦合

电子的自旋与轨道相互作用可以从狄喇克方程得出. 为了证明这一点,我们讨论电子在辏力场中的运动,并作非相对论过渡.

设电子在原子核的库仑引力场 $\varphi(r)$ 中运动,$\boldsymbol{A}=0$. 令 $-e\varphi(r)=V(r)$,则得电子在辏力场中运动的狄喇克方程:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = [c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p} + mc^2\beta + V(r)]\Psi \qquad (1)$$

对于定态解

$$\Psi = \psi e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \qquad (2)$$

则由(1)式得哈密顿算符的本征方程

$$[c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+mc^2\beta+V(r)]\psi=E\psi \tag{3}$$

将 ψ 写成如下形式

$$\psi=\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix} \tag{4}$$

其中 φ 表示 ψ 的前面两个分量，χ 表示 ψ 的后面两个分量.

采用泡利-狄喇克表象，注意到 §2(15)式和(17)式，则(3)式变成

$$c\begin{pmatrix}0 & \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}+mc^2\begin{pmatrix}E & 0\\ 0 & -E\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}+V\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix}=E\begin{pmatrix}\varphi\\ \chi\end{pmatrix} \tag{5}$$

由此得

$$c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\chi+mc^2\varphi+V\varphi=E\varphi \tag{6a}$$

$$c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\varphi-mc^2\chi+V\chi=E\chi \tag{6b}$$

下面我们讨论在非相对论极限下的近似解. 令

$$E=E'+mc^2$$

式中 $E'=E-mc^2$ 相当于非相对论极限下的粒子能量. 由(6b)式得

$$\begin{aligned}\chi&=\frac{1}{E'+2mc^2-V}c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\varphi\\ &=\frac{1}{2mc^2}\Big(1+\frac{E'-V}{2mc^2}\Big)^{-1}c\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\varphi\\ &\simeq\frac{1}{2mc}\Big(1-\frac{E'-V}{2mc^2}\Big)\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\varphi\end{aligned} \tag{7}$$

由上式可以看出，(4)式中 φ 是大分量，χ 是小分量，因为当 $\frac{v}{c}\to 0$ 时，$\chi\to 0$，将上式代入(6b)式得

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2m}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\varphi-\frac{E'}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\varphi\\ &\quad+\frac{1}{4m^2c^2}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})V(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})\varphi+V\varphi=E'\varphi\end{aligned} \tag{8}$$

利用 §3(13)式中的公式

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{A})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B})=(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})+i\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})$$

可化简

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p})=p^2,$$

$$(\sigma \cdot p)V(\sigma \cdot p) = V(\sigma \cdot p)(\sigma \cdot p) + [\sigma \cdot (pV)](\sigma \cdot p)$$
$$= Vp^2 + (pV) \cdot p + i\sigma \cdot [(pV) \times p]$$

于是，(8)式化为

$$(\frac{p^2}{2m} + V)\varphi - \frac{E' - V}{4m^2c^2}p^2\varphi$$
$$+ \frac{1}{4m^2c^2}\{(pV) \cdot (p\varphi) + i\sigma \cdot [(pV) \times p]\varphi\} = E'\varphi \qquad (9)$$

上式左边第二项

$$\frac{E' - V}{4m^2c^2}p^2 \simeq \frac{p^2}{2m} \cdot \frac{p^2}{4m^2c^2} = \frac{p^4}{8m^3c^2}$$

是相对论效应引起的小的修正，在非相对论极限下可以略去，或与(9)式右边 E' 的相对论修正相抵消，因为

$$E' = E - mc^2 = (c^2p^2 + m^2c^4)^{1/2} - mc^2$$
$$\simeq \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2}$$

(9)式左边第三项可化简如下：

$$(pV) \cdot (p\varphi) = -\hbar^2 \frac{dV}{dr}\frac{d\varphi}{dr},$$

$$(pV) \times p = -i\hbar\nabla V(r) \times p = -i\hbar \frac{1}{r}\frac{dV}{dr}r \times p$$
$$= -i\hbar \frac{1}{r}\frac{dV}{dr}L$$

代入(9)式，最后得到

$$[\frac{p^2}{2m} + V(r)]\varphi - \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\frac{dV}{dr}\frac{d\varphi}{dr}$$
$$+ \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}S \cdot L\varphi = E'\psi \qquad (10)$$

其中

$$\frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}S \cdot L \qquad (11)$$

代表电子的自旋与轨道的耦合(spin-orbit coupling)记为

$$\xi(r)S \cdot L$$

其中

$$\xi(r) = \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr} \qquad (12)$$

(10)式中第二项$-\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\frac{dV}{dr}\frac{d}{dr}$是狄喇克方程所特有的，没有经典的对应项.

§7 氢原子能级的精细结构

1. 辏力场中电子的守恒量

在非相对论情况下，在中心力场$V(r)$中运动的粒子，哈密顿量为

$$
\begin{aligned}
H &= -\frac{\hbar^2}{2m^2}\nabla^2 + V(r) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m^2}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r)
\end{aligned}
\tag{1}
$$

容易证明

$$[\boldsymbol{L}, H] = 0 \tag{2}$$

即角动量$\boldsymbol{L}$是守恒量，因而$\boldsymbol{L}^2$也是守恒量. 所以常选$(H, \boldsymbol{L}^2, L_z)$为守恒量完全集，它们的共同本征态记为$\psi_{nlm}$.

若粒子还受到自旋轨道耦合作用$\xi(r)\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}$，由于$[\boldsymbol{L}, \boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}]\neq 0$，轨道角动量$\boldsymbol{L}$将不再是守恒量. 但

$$[\boldsymbol{L}^2, \boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}] = 0 \tag{3}$$

$\boldsymbol{L}^2$仍为守恒量. 若令

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}, \quad \boldsymbol{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma} \tag{4}$$

则$[\boldsymbol{J}, \boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{L}] = 0$，因而

$$[\boldsymbol{J}, H] = 0 \tag{5}$$

即$\boldsymbol{J}$是守恒量，$\boldsymbol{J}^2$也是守恒量. 因此，常选$(H, \boldsymbol{L}^2, \boldsymbol{J}^2, J_z)$为守恒量完全集，相应的本征函数记为$\psi_{nljm_j}$$(l = j \pm \frac{1}{2})$. 我们还可以注意到，在非相对论情形下，体系状态的宇称π由$\boldsymbol{L}^2$的量子数l完全决定：$\pi = (-1)^l$，因此，也可以选$(H, \boldsymbol{J}^2, J_z, \pi)$为守恒量完全集.

在相对论情况下，在中心力场$V(r)$中运动的粒子，相应的能量本征方程已由§6(3)式给出，即

$$[c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+mc^2\beta+V(r)]\psi=E\psi \tag{6}$$

其中①

$$H=c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+mc^2\beta+V(r) \tag{7}$$

可以证明

$$[\mathbf{L}^2,H]=i\hbar c[\mathbf{L}\cdot(\boldsymbol{\alpha}\times\boldsymbol{p})+(\boldsymbol{\alpha}\times\boldsymbol{p})\cdot\mathbf{L}]\neq 0 \tag{8}$$

即 L^2 不是守恒量，但

$$[\boldsymbol{J},H]=0 \tag{9}$$

因而总角动量 $\boldsymbol{J}$ 是守恒量，从而 $\boldsymbol{J}^2$ 也是守恒量. 从

$$\boldsymbol{J}^2=(\mathbf{L}+\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Sigma})^2=\mathbf{L}^2+\hbar\boldsymbol{\Sigma}\cdot\mathbf{L}+\frac{3}{4}\hbar^2 \tag{10}$$

得

$$\hbar\boldsymbol{\Sigma}\cdot\mathbf{L}=\boldsymbol{J}^2-\mathbf{L}^2-\frac{3}{4}\hbar^2 \tag{11}$$

可见，$\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{L}$ 也不是守恒量，(这一点与非相对论中 $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{L}$ 是守恒量不相同). 但是，可以证明②

$$\hbar K\equiv\beta(\boldsymbol{\Sigma}\cdot\mathbf{L}+\hbar) \tag{12}$$

是守恒量，即

$$[\hbar K,H]=0 \tag{13}$$

现在我们求 $\hbar K$ 的本征值 $k\hbar$. 利用 $\beta^2=1,[\beta,\boldsymbol{\Sigma}]=0$，则由(12)式可得

$$\begin{aligned}\hbar^2K^2&\equiv\beta^2(\boldsymbol{\Sigma}\cdot\mathbf{L}+\hbar)^2=(\boldsymbol{\Sigma}\cdot\mathbf{L})^2+2\hbar\boldsymbol{\Sigma}\cdot\mathbf{L}+\hbar^2\\&=L^2+\hbar\boldsymbol{\Sigma}\cdot\mathbf{L}+\hbar^2\end{aligned} \tag{14}$$

其中用了

$$(\boldsymbol{\Sigma}\cdot\mathbf{L})(\boldsymbol{\Sigma}\cdot\mathbf{L})=\mathbf{L}^2+i(\boldsymbol{\Sigma}\cdot(\mathbf{L}\times\mathbf{L})=\mathbf{L}^2+\hbar\boldsymbol{\Sigma}\cdot\mathbf{L}$$

比较(11)式和(14)式可得

$$\hbar^2K^2=\boldsymbol{J}^2+\frac{\hbar^2}{4} \tag{15}$$

注意到 $\boldsymbol{J}^2$ 的本征值为

---

① 参阅曾谨言编著，量子力学，下册，P. 592.

② 参阅 J. J. SAKURAI, Advanced Quantum Mechanics, P. 122.

$$j(j+1)\hbar^2, \quad j=\frac{1}{2},\frac{3}{2},\frac{5}{2},\cdots \tag{16}$$

所以 $\hbar^2K^2$ 的本征值由下式给出：

$$\hbar^2k^2=[j(j+1)+\frac{1}{4}]\hbar^2=(j+\frac{1}{2})^2\hbar^2$$

于是，
$$k^2=(j+\frac{1}{2})^2$$

由此得到
$$k=\pm(j+\frac{1}{2})=\pm 1,\pm 2,\pm 3,\cdots \tag{17}$$

即给定 j 值，k 有两个值与之对应，相当于两种宇称态. 因此可以用算符 K 代替(J^2,π).

2. 辏力场中狄喇克方程在球坐标中的表示

为了求得在辏力场中电子的狄喇克方程的解，首先用球极坐标把辏力场中狄喇克方程§6(3)式表示出来. 为此，首先要找出哈密顿量如何用 K 来表示. 由(6)式可知，H 中只有第一项 $c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}$ 与角量坐标有关，其余部分与角量坐标无关，因而与 K 无关. 因此我们先化简 $c\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}$ 项.

利用§3(13)式，可证①

$$(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{r})=r^2$$

$$\frac{1}{r}(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p})=\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}+\frac{i}{r}\boldsymbol{\Sigma}\cdot(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p})$$
$$=i\hbar\frac{\partial}{\partial r}+\frac{i}{r}\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{L}$$

从而

$$\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}=\frac{1}{r^2}(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p})$$

---

① 因为

$$\frac{\partial}{\partial r}=\frac{x}{r}\frac{\partial}{\partial x}+\frac{y}{r}\frac{\partial}{\partial y}+\frac{z}{r}\frac{\partial}{\partial z}=\frac{i}{\hbar r}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}$$

故
$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial r}=\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}.$$

$$=\frac{1}{r}(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{r})(\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}+\frac{i}{r}\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{L})$$

$$=\alpha_r(\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}+\frac{i}{r}\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{L}) \tag{18}$$

其中
$$\alpha_r=\frac{1}{r}(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{r}) \tag{19}$$

称为"径向速度"算符.

由(12)式可知

$$\boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{L}=\beta\hbar K-\hbar$$

代入(18)式得

$$\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}=\alpha_r(\frac{1}{r}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}-\frac{i\hbar}{r}+\frac{i\hbar}{r}\beta K)$$

$$=\alpha_r(p_r+\frac{i\hbar}{r}\beta K) \tag{20}$$

其中
$$p_r=\frac{1}{r}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}-i\hbar)$$

$$=-i\hbar(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}) \tag{21}$$

只与径向坐标有关,可称为"径向动量"算符.

现在证明,α_r 与 p_r 都是厄密算符.利用 $\boldsymbol{\alpha}$ 与 $\boldsymbol{r}$ 的可对易性,有

$$\alpha_r^+=(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{r})^+r^{-1}=(\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{r})r^{-1}=\alpha_r \tag{22}$$

及
$$p_r=r^{-1}(xp_x+yp_y+zp_z-i\hbar)$$

$$p_r^+=(xp_x+yp_y+zp_z-i\hbar)^+r^{-1}$$

$$=(xp_x+yp_y+zp_z-2i\hbar)r^{-1}$$

$$=(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}-2i\hbar)r^{-1}$$

$$=(rp_r-i\hbar)r^{-1}$$

$$=p_rr\cdot r^{-1}=p_r \tag{23}$$

其中用了(21)式和 r 与 p_r,x 与 p_x 等等对易关系.

还可证明,①

$$\alpha_r\beta+\beta\alpha_r=0 \tag{24}$$

---

① 例如,参阅周世勋编,量子力学,P. 393.

$$\alpha_r^2 = 1 \tag{25}$$

利用(20)式，可将哈密顿量表为

$$H = c\alpha_r p_r + i\hbar c r^{-1}\alpha_r \beta K + \beta mc^2 + V(r) \tag{26}$$

于是，(6)式变成

$$\left[c\alpha_r p_r + \frac{i\hbar c}{r}K\alpha_r\beta + mc^2\beta + V(r)\right]\psi = E\psi \tag{27}$$

这就是辏力场中狄喇克方程在球坐标中的表示式.

由于势场是中心力场，若选 ψ 为 K 的本征态(即 J^2 及 π 的本征态)，则 ψ 的角量及自旋部分波函数与径向部分波函数 $R(r)$ 可以分离. 要找出电子的能量本征值 E，只需要求解径向方程. 由(27)式可得径向方程为

$$\left[c\alpha_r p_r + \frac{ic\hbar}{r}k\alpha_r\beta + mc^2\beta + V(r)\right]R(r) = ER(r) \tag{28}$$

值得注意，上式只含有 $k = (=\pm(j+\frac{1}{2}))$，但不含 m_j，因此 E 与 m_j 无关，故能级是$(2j+1)$重简并的.

在(28)式中，只出现 α_r 与 β 两个矩阵，而它们满足(24)、(25)两式和 $\beta^2=1$，与泡利矩阵相似，可以选为 2×2 矩阵. 选取 β 为对角矩阵的表象对求解径向方程是方便的，即

$$\beta = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix},\quad \alpha_r = \begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix},\quad -i\alpha_r\beta = \begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix} \tag{29}$$

同时，将波函数 $R(r)$ 表为二分量形式：

$$R(r) = \begin{pmatrix}f_1(r)/r\\ f_2(r)/r\end{pmatrix} \tag{30}$$

将(29)和(30)两式代入(28)式得

$$\begin{aligned}&\left[cp_r\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix} + i\hbar c r^{-1}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}k\right.\\ &\left.+ mc^2\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} + V(r)\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\right]\begin{pmatrix}f_1(r)/r\\ f_2(r)/r\end{pmatrix} = E\begin{pmatrix}f_1(r)/r\\ f_2(r)/r\end{pmatrix}\end{aligned} \tag{31}$$

考虑到 $$p_r\frac{f(r)}{r} = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)\frac{f(r)}{r} = -\frac{i\hbar}{r}\frac{\partial f}{\partial r}. \tag{32}$$

(31)式可化为两个联立方程：

$$\left.\begin{aligned}&[mc^2 - E + V(r)]f_1(r) - \hbar c[\frac{k}{r} + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}]f_2(r) = 0\\&\hbar c(\frac{k}{r} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r})f_1(r) + [mc^2 + E - V(r)]f_2(r) = 0\end{aligned}\right\} \quad (33)$$

这就是褛力场中狄喇克方程的径向波函数在球坐标中满足的方程.

3. 电子在库仑场中的解

现在我们来计算氢原子的能级. 对氢原子，势能的形式是

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} \quad (34)$$

代入(33)式化为

$$\begin{aligned}&(mc^2 - E - \frac{e^2}{r})f_1(r) - \hbar c(\frac{k}{r} + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r})f_2(r) = 0\\&\hbar c(\frac{k}{r} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r})f_1(r) + (mc^2 + E + \frac{e^2}{r})f_2(r) = 0\end{aligned} \quad (35)$$

以下限于求束缚态解($E < mc^2$). 为方便起见，引进无量纲参数，令

$$c_1 = (mc^2 + E)/\hbar c, \quad c_2 = (mc^2 - E)/\hbar c \quad (36)$$

$$a = \sqrt{c_1 c_2} = \sqrt{m^2c^4 - E^2}/\hbar c \quad (37)$$

$$\rho = ar \quad (38)$$

可将(35)式化为

$$\left.\begin{aligned}&(\frac{c_2}{a} - \frac{\alpha}{\rho})f_1 - (\frac{k}{\rho} + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho})f_2 = 0\\&(\frac{k}{\rho} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho})f_1 + (\frac{c_1}{a} + \frac{\alpha}{\rho})f_2 = 0\end{aligned}\right\} \quad (39)$$

式中

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137} \quad (40)$$

称为精细结构常数(fine structure constant).

引进代换

$$f_1(\rho) = g_1(\rho)e^{-\rho}, \quad f_2(\rho) = g_2(\rho)e^{-\rho} \quad (41)$$

代入(39)式并注意

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}(e^{-\rho}f) = e^{-\rho}(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho} - 1)f$$

可得函数 g_1 和 g_2 所满足的方程

$$\left.\begin{aligned}(\frac{c_2}{a} - \frac{a}{\rho})g_1 - \frac{k}{\rho}g_2 + g_2 - \frac{\mathrm{d}g_2}{\mathrm{d}\rho} = 0 \\ \frac{k}{\rho}g_1 + g_1 - \frac{\mathrm{d}g_1}{\mathrm{d}\rho} + (\frac{c_1}{a} + \frac{a}{\rho})g_2 = 0\end{aligned}\right\} \tag{43}$$

现在求(43)式的一般解.用级数解法,令

$$g_1 = \sum_{\nu=0}^{\infty} b_\nu \rho^{s+\nu}, \quad g_2 = \sum_{\nu=0}^{\infty} d_\nu \rho^{s+\nu} \tag{44}$$

代入(43)式,得

$$(\frac{c_2}{a} - \frac{a}{\rho})\sum_\nu b_\nu \rho^{s+\nu} + (1 - \frac{k}{\rho})\sum_\nu d_\nu \rho^{s+\nu} - \sum_\nu (s+\nu)d_\nu \rho^{s+\nu-1} = 0$$

及

$$(1 + \frac{k}{\rho})\sum_\nu b_\nu \rho^{s+\nu} - \sum_\nu (s+\nu)b_\nu \rho^{s+\nu-1} + (\frac{c_1}{a} + \frac{a}{\rho})\sum_\nu d_\nu \rho^{s+\nu} = 0$$

比较以上等式两边 $\rho^{s+\nu-1}$的系数,得

$$\frac{c_2}{a}b_{\nu-1} - ab_\nu + d_{\nu-1} - (k+s+\nu)d_\nu = 0 \tag{45a}$$

$$b_{\nu-1} - (s+\nu-k)b_\nu + \frac{c_1}{a}d_{\nu-1} - ad_\nu = 0 \tag{45b}$$

以$\frac{c_2}{a}$乘(45b)减去(45a)式可消去 $d_{\nu-1}$和 $b_{\nu-1}$,得

$$[\frac{-c_2}{a}(s+\nu-k) + a]b_\nu + [\frac{c_2}{a}a + (k+s+\nu)]d_\nu = 0 \tag{46}$$

当 $\nu \gg 1$ 时,由上式得

$$\frac{b_\nu}{d_\nu} \simeq \frac{a}{c_2} \tag{47}$$

代入(45a)式,得出当 ρ 和 ν 很大时,有

$$\frac{d_\nu}{d_{\nu-1}} \simeq \frac{2}{\nu} \quad \frac{b_\nu}{b_{\nu-1}} \simeq \frac{2}{\nu} \tag{48}$$

注意到 $e^{2\rho}=\sum\limits_{\nu=0}^{\infty}\frac{2^\nu\rho^\nu}{\nu!}$展开式中 ρ^ν 项与 $\rho^{\nu-1}$项的系数之比为$\frac{2}{\nu}$，可以推断，当 $\rho\to\infty$时，级数 $g_1(\rho)$和 $g_2(\rho)$具有 $e^{2\rho}$的形式. 为保证当 $\rho\to\infty$时 $f_1(\rho)$和 $f_2(\rho)$有限，必须把无穷级数从某一项开始切断而退化为多项式. 假设这一项就是 $\nu=n'$的项，即

$$b_{n'+1}=d_{n'+1}=0,\quad n'=0,1,2,\cdots \tag{49}$$

于是，(45a) 式变为

$$c_2b_{n'}+ad_{n'}=0 \tag{50}$$

在(46)式中取 $\nu=n'$，有

$$[-c_2(s+n'-k)+\alpha a]b_{n'}+[c_2\alpha+(k+s+n')a]d_{n'}=0 \tag{51}$$

(50)式和(51)式是关于 $b_{n'}$和 $d_{n'}$的联立方程组，$b_{n'}$和 $d_{n'}$有非零解的条件是

$$\begin{vmatrix} c^2 & a \\ -c_2(s+n'-k)+\alpha a & c_2\alpha+(k+s+n')a \end{vmatrix}=0$$

即

$$\alpha(c_1-c_2)=2(s+n')a \tag{52}$$

将 c_1,c_2 及 a 值代入上式得

$$\alpha E=(s+n')\sqrt{m^2c^4-E^2}$$

由此解出：

$$E=mc^2\left(1+\frac{\alpha^2}{(n'+s)^2}\right)^{-1/2} \tag{53}$$

上式中 s 确定如下. 在(45a)式和(45b)式中，令 $\nu=0$，并注意 $b_{-1}=d_{-1}=0$，有

$$\left.\begin{aligned} -\alpha b_0-(k+s)d_0=0 \\ -(s-k)b_0+\alpha d_0=0 \end{aligned}\right\}$$

其中 b_0,d_0 不全为零的条件是

$$\begin{vmatrix} -\alpha & -(k+s) \\ -(s-k) & \alpha \end{vmatrix}=0$$

由此得

$$s=\pm\sqrt{k^2-\alpha^2}$$

为了保证 g_1,g_2 在 $\rho=0$ 处不发散，上式右端只能取正号，即

$$s=\sqrt{k^2-\alpha^2}$$

将上式代入(53)式，就得到氢原子的能级公式

$$E = mc^2\left[1 + \frac{\alpha^2}{(\sqrt{k^2 - \alpha^2} + n')^2}\right]^{-1/2} \tag{55}$$

4. 氢原子光谱的精细结构

在(55)式中，$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137}$是一个小量，为便于与非相对论量子力学的计算结果对比，将 E 按 α^2 作幂级数展开① 得

$$E = mc^2\left[1 - \frac{\alpha^2}{2n^2} - \frac{\alpha^4}{2n^4}\left(\frac{n}{|k|} - \frac{3}{4}\right) + \cdots\right] \tag{56}$$

式中 $$|k| = 1,2,3,\cdots$$

$$n = n' + |k| = 1,2,3,\cdots \tag{57}$$

称为总量子数(total quantum number).

由(56)式可以看出，氢原子能级不仅与总量子数 n 有关，而且与$|k|$有关，即与 j 有关. 式中第三项远比第二项为小，在非相对论极限下，略去第三项，则能量只与总量子数 n 有关：

$$E \simeq mc^2\left(1 - \frac{\alpha^2}{2n^2}\right) \tag{58}$$

可见除一个常数项 mc^2 外，上式与玻尔的氢原子能级公式相同. 因此，(56)式中第三项即为相对论修正的主项.

索末菲(Sommerfeld)在量子力学出现之前(1916 年)，曾在玻尔量子论的基础上加进相对论修正，得出与(56)式相当的结果. 不过，索末菲的结果之所以正确，带有一定的偶然性. 事实上，这是由于玻尔理论的误差与不考虑自旋所引起的误差恰好相互抵消了.

(56)式也可改写成

$$E - mc^2 = -\frac{mc^2\alpha^2}{2n^2}\left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2}\left(\frac{n}{|k|} - \frac{3}{4}\right) + \cdots\right]$$

$$= -\frac{e^2}{a_0}\frac{1}{2n^2}\left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2}\left(\frac{n}{|k|} - \frac{3}{4}\right) + \cdots\right] \tag{59}$$

其中 $a_0 = \hbar^2/mc^2$ 是玻尔半径.

若用量子数 j 来表示，注意到$|k| = j + \frac{1}{2}$，则(55)式和(59)式

---

① 参阅曾谨言编著，量子力学，下册，P. 601

可改写成

$$E = mc^2\left[1+\frac{\alpha^2}{\sqrt{(j+\frac{1}{2})^2-\alpha^2+n')^2}}\right]^{-1/2}$$

$$= mc^2 - \frac{R}{n^2}\left[1+\frac{\alpha^2}{n^2}\left(\frac{n}{j+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right)+\cdots\right] \tag{60}$$

其中

$$\left.\begin{aligned} &R=\frac{e^2}{2a_0}=\frac{me^4}{2\hbar^2}=\alpha^2\frac{mc^2}{2}=13.605\text{ 电子伏} \\ &n=1,2,3,\cdots \\ &j=\frac{1}{2},\frac{3}{2},\cdots,n-\frac{1}{2} \end{aligned}\right\} \tag{61}$$

在非相对论量子力学计算结果(玻尔公式)中,氢原子能级只与主量子数 n 有关,与 l 无关,即 $l=0,1,2,\cdots,n-1$ 诸能级位置相重合.而按相对论量子力学计算结果(见(60)式),氢原子能级与主量子数以及总角动量量子数 j 都有关($j=\frac{1}{2},\frac{3}{2},n-\frac{1}{2}$,共 n 条).但由于 α 很小,相对论修正引起的能级分裂是很小的,这就构成氢原子光谱的精细结构,图 9-2 是氢原子能级示意图.

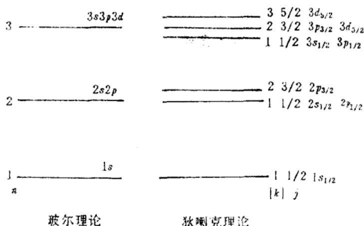


图 9-2

实验证明：当氢原子中电子由一个态(n_1,k_1)跃迁到另一个态(n_2,k_2)，且n_1,n_2固定而k_1,k_2取各种不同值时，由于能级分裂很小，辐射的频率相差也很小. 理论计算结果与氢原子光谱的精细结构实验一致，这是狄喇克的相对论量子力学取得的一个重要结果.

氢原子光谱理论的发展，是量子力学理论发展的一个缩影. 实验观察肯定了狄喇克理论所给出的相对论修正. 然而早在30年代，就有人发现狄喇克理论与氢原子光谱精细结构的观测有些小的差异，但由于当时实验精确度不够，没有引起我们的重视. 直到1947年，兰姆(Lamb)和勒瑟福(Retherford)利用微波波谱精密测量了氢原子光谱的精细结构，肯定了属于同一个(n,j)能级实际上有微小的分裂. 例如$2^2s_{1/2}-2^2p_{1/2}$能级，按宇称不同，分裂为两条，其中$2^2p_{1/2}$能级确与狄喇克理论相符，但$2^2s_{1/2}$的能级比理论值差高一些，($\triangle\omega\simeq1057.8\pm0.1$兆周/秒). 这就是著名的氢原子能级的兰姆移动(Lamb shift). 此外，尚有$3s_{1/2}$略高于$3p_{1/2}$，$3d_{3/2}$略高于$3p_{3/2}$等. 与电子的反常磁矩类似，氢原子能级的兰姆移位是作为单电子理论的狄喇克相对论量子力学所不能解释的. 有兴趣的读者，可参阅有关量子电动力学或量子场论的书籍.

§8　狄喇克方程的协变性

1. 狄喇克方程的不变性条件

取自然单位，$\hbar=c=1$

四维时空坐标 $x_\mu\equiv(x_1,x_2,x_3,it)$

作洛仑兹变换

$$x_\mu\rightarrow x_\mu'=a_{\mu\nu}x_\nu \tag{1}$$

其中

$$\left.\begin{aligned}a_{\mu\nu}a_{\mu\lambda}&=\delta_{\nu\lambda}\\a_{\mu\nu}a_{\lambda\nu}&=\delta_{\mu\lambda}\end{aligned}\right\} \tag{2}$$

我们假定，在洛仑兹变换下，波函数$\Psi(x)$作如下变换：

$$\Psi(x)\rightarrow\Psi'(x')=\Lambda\Psi(x) \tag{3}$$

其中 Λ 是 4×4 非奇异矩阵，它只与 $a_{\mu\nu}$ 有关，而与坐标 x_μ 无关.

在 x 坐标系中，狄喇克方程由 § 2(29)式给出

$$(\gamma_\mu \partial_\mu + m)\Psi(x) = 0 \tag{4}$$

我们要求在新坐标 x' 系中，狄喇克方程仍保持原来的形式，即

$$(\gamma_\mu \partial'_\mu + m)\Psi'(x') = 0 \tag{5}$$

注意到

$$\partial'_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x'_\mu} = \frac{\partial x_\nu}{\partial x'_\mu}\frac{\partial}{\partial x_\nu} = a_{\mu\nu}\frac{\partial}{\partial x_\nu} \equiv a_{\mu\nu}\partial_\nu \tag{6}$$

并将(1)式和(3)式代入(5)式，得

$$\gamma_\mu \Lambda a_{\mu\nu}\partial_\nu \Psi + m\Lambda\Psi = 0$$

以 Λ^{-1} 左乘上式得

$$\Lambda^{-1}\gamma_\mu \Lambda a_{\mu\nu}\partial_\nu \Psi + m\Psi = 0 \tag{7}$$

将上式与(4)式比较得

$$\Lambda^{-1}\gamma_\mu \Lambda a_{\mu\nu} = \gamma_\nu$$

上式两边乘 $a_{\rho\nu}$ 并对 ν 求和，并利用(2)式便得到

$$\Lambda^{-1}\gamma_\mu \Lambda = a_{\mu\nu}\gamma_\nu \tag{8}$$

这就是狄喇克方程在洛仑兹变换下保持不变性所需要满足的条件.

由上讨论可知，如果条件(8)式满足，则在不同的惯性系中，狄喇克方程具有完全相同的形式，这就是狄喇克方程的洛仑兹不变性(Lorentz invariance). 这正是相对性原理所要求的.

2. 反射变换的 Λ 矩阵

(8)式能否满足呢？

对空间反射

$$a = \begin{pmatrix} -1 & & & 0 \\ & -1 & & \\ 0 & & -1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix}, \quad \det a = -1 \tag{9}$$

即

$$\left.\begin{aligned} x'_k &= -x_k, \quad k = 1,2,3 \\ x'_4 &= x_4 \end{aligned}\right\} \tag{10}$$

此时，(8)式变成

$$\left.\begin{aligned} \Lambda^{-1}\gamma_k\Lambda &= -\gamma_k, \quad k = 1,2,3 \\ \Lambda^{-1}\gamma_4\Lambda &= \gamma_4 \end{aligned}\right\} \tag{11}$$

上式当

$$\Lambda = \eta_\rho \gamma_4 \tag{12}$$

时满足，其中 η 满足

$$\eta_\rho^* \eta_\rho = 1 \tag{13}$$

故 Λ 的可能选择是 $\pm\gamma_4$，$\pm i\gamma_4$.

对时间反演

$$a = \begin{pmatrix} 1 & & & 0 \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ 0 & & & -1 \end{pmatrix}, \quad \det a = -1 \tag{14}$$

即

$$\left.\begin{aligned} x_k' &= x_k, \quad k = 1,2,3 \\ x_4' &= -x_4 \end{aligned}\right\} \tag{15}$$

此时，(8)式变为

$$\left.\begin{aligned} \Lambda^{-1}\gamma_k\Lambda &= \gamma_k, \quad k = 1,2,3 \\ \Lambda^{-1}\gamma_4\Lambda &= -\gamma_4 \end{aligned}\right\} \tag{16}$$

当 $\Lambda = \pm\gamma_1\gamma_2\gamma_3$ 或 $\Lambda = \pm i\gamma_1\gamma_2\gamma_3$ 时上式满足.

于是，我们看到，对反射变换，(8)式满足，狄喇克方程具有洛仑兹不变性.

3. 真洛仑兹变换的 Λ 矩阵

对真洛仑兹变换(proper Lorentz transformation)($\det a = +1$, $a_{44} > 0$)，(8)式是否满足呢？

真洛仑兹变换的一个特例是单纯的洛仑兹变换(pure Lorentz transformation)，它是两个惯性系之间的坐标变换. 例如，x' 系沿 x_1 方向以匀速 V 相对于 x 系运动，则由狭义相对论有

$$\begin{pmatrix} x_1' \\ x_2' \\ x_3' \\ x_4' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \eta & 0 & 0 & i\eta\frac{V}{c} \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -i\eta\frac{V}{c} & 0 & 0 & \eta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} \tag{17}$$

式中

$$\eta = \frac{1}{\sqrt{1 - V^2/c^2}} \tag{18}$$

并且

$$a = \begin{pmatrix} \eta & 0 & 0 & i\eta\frac{V}{c} \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -i\eta\frac{V}{c} & 0 & 0 & \eta \end{pmatrix} \tag{19}$$

显然

$$\det a = \eta^2 + i^2\eta^2\frac{V^2}{c^2} = \eta^2\left(1 - \frac{V^2}{c^2}\right) = 1, a_{44} > 0 \tag{20}$$

对真洛仑兹变换,可以从恒等变换($a_{\mu\nu}=\delta_{\mu\nu}$)出发,经过相继的一系列的无穷小变换(infinitesimal transformation)来完成.所以只需研究无穷小变换.

无穷小变换定义为

$$\begin{aligned} x_\mu' &= x_\mu + \varepsilon_{\mu\nu}x_\nu \\ &= (\delta_{\mu\nu} + \varepsilon_{\mu\nu})x_\nu \end{aligned} \tag{21}$$

即对无穷小变换而言

$$a_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} + \varepsilon_{\mu\nu} \tag{22}$$

将上式代入(2)式得

$$\begin{aligned} \delta_{\mu\nu} &= (\delta_{\mu\lambda} + \varepsilon_{\mu\lambda})(\delta_{\nu\lambda} + \varepsilon_{\nu\lambda}) \\ &= \delta_{\mu\lambda}\delta_{\nu\lambda} + \delta_{\mu\lambda}\varepsilon_{\nu\lambda} + \varepsilon_{\mu\lambda}\delta_{\nu\lambda} + \varepsilon_{\mu\lambda}\varepsilon_{\nu\lambda} \\ &= \delta_{\mu\nu} + \varepsilon_{\nu\mu} + \varepsilon_{\mu\nu} + 0^2(\varepsilon) \end{aligned}$$

略去上式中的二阶无穷小量,则得

$$\varepsilon_{\mu\nu} = -\varepsilon_{\nu\mu} \tag{23}$$

这是无穷小变换必须满足的条件.

下面证明,对无穷小洛仑兹变换,可以找到 Λ 的显示式,使得(8)式被满足.

因为 Λ 依赖于 $a_{\mu\nu}$,对无穷小变换而言,Λ 依赖于 $\varepsilon_{\mu\nu}$,可将 Λ 展为 $\varepsilon_{\mu\nu}$的幂级数,略去高次项,表示为

$$\Lambda = 1 + \frac{1}{2}\varepsilon_{\mu\nu}S_{\mu\nu} \tag{24}$$

其中 $\varepsilon_{\mu\nu}=-\varepsilon_{\nu\mu}$,故 $S_{\mu\nu}=-S_{\nu\mu}$. 考虑到 $\Lambda^{-1}\Lambda=1$,与(24)式对应有 Λ 和 Λ^{-1}及(22)式代入(8)式得

$$\Lambda^{-1} = 1 - \frac{1}{2}\varepsilon_{\mu\nu}S_{\mu\nu} \tag{25}$$

将 Λ 和 Λ^{-1}及(22)式代入(8)式得

$$\left(1 - \frac{1}{2}\varepsilon_{\lambda\nu}S_{\lambda\nu}\right)\gamma_{\mu}\left(1 + \frac{1}{2}\varepsilon_{\lambda\nu}S_{\lambda\nu}\right) = (\delta_{\mu\nu} + \varepsilon_{\mu\nu})\gamma_{\nu}$$

略去二阶小量,得

$$\gamma_{\mu} - \frac{1}{2}\varepsilon_{\lambda\nu}S_{\lambda\nu}\gamma_{\mu} + \frac{1}{2}\gamma_{\mu}\varepsilon_{\lambda\nu}S_{\lambda\nu} = \gamma_{\mu} + \varepsilon_{\mu\nu}\gamma_{\nu}$$

即

$$\frac{1}{2}\varepsilon_{\lambda\nu}(\gamma_{\mu}S_{\lambda\nu} - S_{\lambda\nu}\gamma_{\mu}) = \varepsilon_{\mu\nu}\gamma_{\nu} = \frac{1}{2}\varepsilon_{\lambda\nu}(\delta_{\lambda\mu}\gamma_{\nu} - \delta_{\nu\mu}\gamma_{\lambda})$$

由此得

$$\gamma_{\mu}S_{\lambda\nu} - S_{\lambda\nu}\gamma_{\mu} = \delta_{\lambda\mu}\gamma_{\nu} - \delta_{\nu\mu}\gamma_{\lambda} \tag{26}$$

可以验证,当

$$S_{\lambda\nu} = \frac{1}{4}(\gamma_{\lambda}\gamma_{\nu} - \gamma_{\nu}\gamma_{\lambda}) \tag{27}$$

时,满足(26)式.

由于 $S_{\mu\nu}$的反对称性,上式亦可表为

$$S_{\lambda\nu} = \begin{cases} \frac{1}{2}\gamma_{\lambda}\gamma_{\nu} & \text{当 } \lambda \neq \nu \\ 0, & \text{当 } \lambda = \nu \end{cases} \tag{28}$$

(24)式和(27)式给出无穷小洛仑兹变换下 Λ 矩阵的显示式. 可见,存在 Λ 矩阵,使(8)式满足. 于是,对无穷小洛仑兹变换,或者换句话说,对真洛仑兹变换,狄喇克方程具有不变性.

§9 二分量中微子理论

狄喇克方程可以描述所有自旋为$\frac{1}{2}$的费米子. 其中静质量 $m=0$ 的中微子(neutrino)描述可以简化.

自由粒子的哈密顿量为 $H=\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}+m\beta$,当 $m=0$ 时

$$H=\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p} \tag{1}$$

这时,自由粒子的狄喇克方程(§2(8)式)化为

$$i\frac{\partial}{\partial t}\Psi+i\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla\Psi=0 \tag{2}$$

设上式的平面波解为

$$\Psi=u(p)e^{ipx} \tag{3}$$

则(2)式可变为

$$Eu=\boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p}u \tag{4}$$

$$E=\pm|\boldsymbol{p}| \tag{5}$$

我们可以将(4)式中的 4 分量 u 过渡为二分量函数,为此,设

$$u=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}\omega\\ \omega'\end{pmatrix} \tag{6}$$

其中 ω 和 ω' 均为二分量函数,注意到 §2(17)式和上式,由(4)式可得到两个方程

$$\left.\begin{aligned}E\omega&=\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\omega'\\ E\omega'&=\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\omega\end{aligned}\right\} \tag{7}$$

引进

$$\left.\begin{aligned}\varphi_+&=\frac{1}{\sqrt{2}}(\omega+\omega')\\ \varphi_-&=\frac{1}{\sqrt{2}}(\omega-\omega')\end{aligned}\right\} \tag{8}$$

其中 φ_+,φ_-均为二分量函数,则可得

$$\left.\begin{aligned}E\varphi_+&=\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\varphi_+\\ E\varphi_-&=\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\varphi_-\end{aligned}\right\} \tag{9}$$

定义螺旋性算符

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\frac{\boldsymbol{p}}{|\boldsymbol{p}|} \tag{10}$$

则(9)式可变为

$$\left.\begin{aligned}
\boldsymbol{\sigma}\cdot\frac{\boldsymbol{p}}{|\boldsymbol{p}|}\varphi_{+}=\frac{E}{|\boldsymbol{p}|}\varphi_{+}=\begin{cases}\varphi_{+}, & \text{当 } E=+|\boldsymbol{p}| \\ -\varphi_{+}, & \text{当 } E=-|\boldsymbol{p}|\end{cases} \\
\boldsymbol{\sigma}\cdot\frac{\boldsymbol{p}}{|\boldsymbol{p}|}\varphi_{-}=-\frac{E}{|\boldsymbol{p}|}\varphi_{-}=\begin{cases}-\varphi_{-}, & \text{当 } E=+|\boldsymbol{p}| \\ \varphi_{-}, & \text{当 } E=-|\boldsymbol{p}|\end{cases}
\end{aligned}\right\} \tag{11}$$

若选 $\boldsymbol{p}$ 沿 z 轴方向，则上式变为

$$\left.\begin{aligned}
\sigma_z\varphi_{+}&=\varphi_{+}, \quad \text{当 } E=+|\boldsymbol{p}| \\
\sigma_z\varphi_{+}&=-\varphi_{+}, \quad \text{当 } E=-|\boldsymbol{p}|
\end{aligned}\right\} \tag{12}$$

$$\left.\begin{aligned}
\sigma_z\varphi_{-}&=-\varphi_{-}, \quad \text{当 } E=+|\boldsymbol{p}| \\
\sigma_z\varphi_{-}&=\varphi_{-}, \quad \text{当 } E=-|\boldsymbol{p}|
\end{aligned}\right\} \tag{13}$$

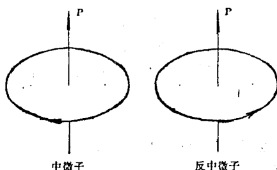


图 9-3

从理论上说，我们可以用 φ_{+}描述中微子，也可以用 φ_{-}描述中微子. 因为 φ_{+}和 φ_{-}均为二分量函数，故称为二分量中微子理论. 但 β 衰变实验指出，中微子的自旋永远与其动量方向反平行，而反中微子的自旋与动量平行. 所以，为了与实验一致，应选取 φ_{-}描述中微子，φ_{+}描述反中微子. 这样，由(13)式看出，正能量的中微子的螺旋性为负，即自旋与动量反平行，可认为中微子是左旋粒子(图 9-3)，态 φ_{-}称为左旋粒子态($\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}}{|\boldsymbol{p}|}=-1$). 同样，由(12)式看出，正能量的反中微子的螺旋性为正，即自旋与动量平行，可称反

中微子是右旋粒子，态 φ_+ 称为右旋粒子态($\frac{\sigma \cdot p}{|p|}=+1$).

(9)式中 φ_+，φ_- 为二分量函数，与 σ 是 2×2 矩阵相一致. 可以用二分量波函数来描述中微子的原因是 $m=0$，因而在 H 的表示式(1)式中不含 β，而 α 的三个分量 $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ 相互反对易，且 $\alpha_i^2=1$，与泡利矩阵具有相同的性质，因而可用 2×2 矩阵表示，通常就选 α 为泡利矩阵 σ. 这样，我们就可得到

$$i\frac{\partial}{\partial t}\Psi + i\sigma\cdot\nabla\Psi = 0 \tag{14}$$

式中 σ 是 2×2 阶泡利矩阵，因而 Ψ 是二分量的波函数，即可表为二行一列矩阵. (14)式常称为韦耳方程(H. Weyl，1926 年)，亦可表为

$$\sigma\cdot p\Psi = E\Psi \tag{15}$$

容易看出，韦耳方程在空间反射下不是不变的. 这是因为在空间反射下 $p\to -p$(p 为极矢量)，$\sigma\to\sigma$(σ 为膺矢量)，因而 $\sigma\cdot p$(膺标量)变号，可见(15)式在空间反射下不是不变的.

由于韦耳方程在空间反射下不是不变的，因而宇称在这个理论中不再是守恒量. 在相当长的时间内，由于没有实验验证，这一理论也就被人们所忽视，直至在弱相互作用中宇称不守恒被发现后，李政道和杨振宁(Lee and Yang，1957)、朗道(Landau，1957)以及萨拉姆(Salam，1957)就分别指出用这一理论来描述中微子，并称之为二分量中微子理论(the two component theory of the neutrino).

第十章　二次量子化

非相对论量子力学在 1925 年～1926 年间建立之后，人们开始冲破了经典物理的框框，对微观世界奥秘的探索呈现出一片生气勃勃的景象，在短短的数年间，又建立了相对论量子力学和场的量子化理论. 当时，量子力学有两个重要的研究方向，一是将薛定谔方程推广到相对论领域，建立了克莱因-戈登方程和狄喇克方程，但都遇到了严重的困难，前者出现负几率和负能量困难，后者出现负能量困难. 诚然，狄喇克方程能够自然地导出电子自旋的结论，能够解释氢原子光谱的精细结构，并且还预言了正电子的存在，但以“电子海”来回避负能量困难又带来了一些根本性的问题. 另一个研究方向是寻找场和实物（粒子）在量子现象中认识上的进一步统一. 在量子力学建立的初期，对实物粒子是用波函数 ψ 来描述它的状态，所谓微观粒子的波动性，是指粒子在空间中的几率分布具有一定的周期性（ψ 是几率波函数）；而对光波来说，根据电磁场量子化的方法，是用算符 A（或 a,a^*）来描述，它的波动性就是光波的连续传播性，而它的粒子性也只是能量的不连续性. 但是，人们很快就发现，通过引入“二次量子化”的描述方式，不仅消除了实物和场在波动性和粒子性两个方面的不对称，而且解决了负几率和负能量的困难.

历史上狄喇克（1927 年）最早将电磁场量子化，从而得出电磁场能量的不连续性. 接着，人们便将非相对论薛定谔方程进行量子化，即所谓“二次量子化”，它把单粒子的薛定谔方程看作是电磁场一样的经典方程，进一步把波函数看作算符并引进对易关系. 因为从质点力学到薛定谔方程已构成第一次量子化，而现在再把 ψ 看作算符，便是第二次量子化了. 其实，在非相对论领域里，二次量子化的描述方式与多粒子的薛定谔方程从坐标表象变换到粒子数表

象所得结果是相同的，因而是彼此等价的描述. 然而，第二次量子化方法将玻色子场和费米子场进行量子化，就得到量子场论.

本章首先介绍电磁场量子化思想，然后讨论非相对论薛定谔方程的量子化即二次量子化方法，指出它与多粒子体系薛定谔方程的表象变换的等价性，最后介绍场量子化概念，作为向量子场论过渡的基础.

§1　电磁场的量子化

1. 历史的回顾

微观运动的量子理论是从普朗克常数 h 的引入开始的. 在1900年，普朗克指出，由实验观察到的电磁辐射的能谱不服从经典电磁理论所预示的规律. 为了解释这个实验上观察到的能谱，普朗克创立了能量子说. 他指出辐射能量具有不连续性，其最小单位称为能量子 $h\nu$，频率为 ν 的电磁波的能量必为 $h\nu$ 的整倍数. 不久以后，爱因斯坦指出上述的能量不连续性应该反映着电磁辐射的"粒子"结构，正象质量的不连续性反映着实物的粒子(原子和电子等)结构一样. 他认为普朗克的能量子就是光子，把电磁场视为光子的集合. 爱因斯坦的这个深刻的观点不久在光电效应(Photoelectric Effect)和康普顿(Compton)效应的实验中得到了证实，显示出电磁场的量子效应. 这可以说是电磁场量子化的初期思想.

大家知道，在经典电磁理论中，电磁场能量

$$E = \frac{1}{2}\int (\boldsymbol{E}^2 + \boldsymbol{H}^2)\mathrm{d}V \tag{1}$$

式中 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 取连续值，不能体现场的量子效应. 因此，必须寻求能够反映量子效应的新理论. 1927年，狄喇克首先仿照量子力学从经典连续的物理量到量子化本征值的过渡方法，把电磁场进行量子化，从而得到量子简谐振子的本征能量为

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega, \quad n = 0,1,2,\cdots \tag{2}$$

式中 $\hbar = \frac{h}{2\pi}$，$\omega = 2\pi\nu$. 由此便得到了电磁辐射的能量子 $h\nu$. 这样，电磁场和实物粒子运动的能量的不连续性就可以由薛定谔方程统一地加以解释；换句话说，实物和电磁场的微观运动都遵循着完全相同的规律.

2. 用振子来展开场

假设我们研究经典的自由电磁场，这时 $j=0$，$\rho=0$. 于是，电磁场可表为：

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{E} &= -\frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} - \nabla\varphi \\ \boldsymbol{H} &= \nabla \times \boldsymbol{A} \end{aligned}\right\} \tag{3}$$

其中 A 满足达郎贝尔(D′ Alembert)方程

$$\nabla^2 \boldsymbol{A} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \boldsymbol{A}}{\partial t^2} = 0 \tag{4}$$

和洛仑兹条件 $$\partial_\nu A_\nu = 0 \tag{5}$$

在库仑规范下，

$$\left.\begin{aligned} \varphi &= 0 \\ \nabla \cdot \boldsymbol{A} &= 0 \end{aligned}\right\} \tag{6}$$

这时(3)式成为

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{E} &= -\frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} \\ \boldsymbol{H} &= \nabla \times \boldsymbol{A} \end{aligned}\right\} \tag{3'}$$

满足(6)式第二式的场称为横场(transverse field)或辐射场(radiation field).

为了简单，我们首先考虑单色线偏振的平面电磁波，$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$用如下的付立叶展开式表出：

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = q_k(t)e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + q_k^*(t)e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{7}$$

上式右端两项互为复共轭，这是为了保证 $\boldsymbol{A}$ 值是实数.

由 $\nabla \cdot \boldsymbol{A} = 0$ 可得出

$$\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{A} = 0 \tag{8}$$

故 $\boldsymbol{A}$ 只有横向分量，即 $\boldsymbol{A}$ 是横场.

为明确起见，设电磁场限制在边长为 L 的具有完全反射壁的箱内，因而箱壁上 $\boldsymbol{A}$ 的值为零. 设容器的中点取为坐标原点，则

$$\boldsymbol{A} = 0, \quad \text{当 } x = \pm \frac{L}{2}, \quad y = \pm \frac{L}{2}, \quad z = \pm \frac{L}{2} \tag{9}$$

满足上式的 $\boldsymbol{k}$ 由下式给出：

$$\left.\begin{aligned} k_x &= \frac{2\pi}{L} n_x, \\ k_y &= \frac{2\pi}{L} n_y, \\ k_z &= \frac{2\pi}{L} n_z \end{aligned}\right\}, \qquad n_x, n_y, n_z \text{ 为整数} \tag{10}$$

将(7)式代入(4)式得

$$\left.\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}^2 q_k(t)}{\mathrm{d}t^2} + \omega^2 q_k(t) &= 0 \\ \frac{\mathrm{d}^2 q_k^*(t)}{\mathrm{d}t^2} + \omega^2 q_k^*(t) &= 0 \end{aligned}\right\} \tag{11}$$

可见，q_k 满足简谐振动方程，其解为

$$\left.\begin{aligned} q_k(t) &= a_k e^{-i\omega t} \\ q_k^*(t) &= a_k^* e^{i\omega t} \end{aligned}\right\} \tag{12}$$

其中
$$\omega = ck = k, \quad (c = \hbar = 1) \tag{13}$$

如果不是单色线偏振波而是复色电磁波，则(7)式应改为

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{\sigma=1,2} \boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k},\sigma} \left[q_{\boldsymbol{k},\sigma} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + q_{\boldsymbol{k},\sigma}^* e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \right] \tag{7'}$$

式中 $\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k},\sigma}$ 为单位极化矢量(unit polarization vectors)，$\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k},\sigma} = 0$. 求和 $\sum\limits_{\sigma=1,2}$ 是对两个偏振态进行的，而 $\sum\limits_{\boldsymbol{k}}$ 是对不同 $\boldsymbol{k}$ 的各个单色分波求和. 这时(11)式应改为

$$\frac{\mathrm{d}^2 q_{\boldsymbol{k},\sigma}(t)}{\mathrm{d}t^2} + \omega^2 q_{\boldsymbol{k},\sigma}(t) = 0, \qquad \text{等等} \tag{11'}$$

由此我们看到，变换(7′)式的作用是把由(4)式描写的在容器

内的电磁辐射的连续运动表为无穷多个(k 值有无穷多个，复色波进行谱分解)简谐振动(11′). 因为简谐运动是我们熟悉的运动，所以引入变换(7′)式具有求解方便的优点. 这个变换把一个偏微分程(4)式变换成无穷多个较易处理的全微分方程(11′)式.

我们可以用 q_k 和 q_k^* 表示电磁场能量. 为此，将(7)式及(3′)式代入(1)式便可得到

$$E = 2Vk^2 q_k^* q_k \tag{14}$$

式中 $V=L^3$. 对复色波则为

$$E = \sum_{k,\sigma} 2Vk^2 q_{k,\sigma}^* q_{k,\sigma} \tag{14′}$$

为了使场的运动方程类似于经典力学的正则方程，引入实"正则变数"(canonical variables)：

$$\left.\begin{aligned} \mathbf{Q}_k &= \sqrt{V}(q_k + q_k^*) \\ \mathbf{P}_k &= -i\sqrt{V}\omega(q_k - q_k^*) = \dot{\mathbf{Q}}_k \end{aligned}\right\} \tag{15}$$

式中 $\mathbf{Q}_k$ 为正则坐标，$\mathbf{P}_k$ 为正则动量. 上式可解出

$$\left.\begin{aligned} q_k &= \frac{1}{2\sqrt{V}}\left(\mathbf{Q}_k + \frac{i}{\omega}\mathbf{P}_k\right) \\ q_k^* &= \frac{1}{2\sqrt{V}}\left(\mathbf{Q}_k - \frac{i}{\omega}\mathbf{P}_k\right) \end{aligned}\right\} \tag{16}$$

将上式代入(14)式得场的哈密顿量为

$$\begin{aligned} H_k &= \frac{1}{2}k^2\left(\mathbf{Q}_k^2 + \frac{1}{\omega^2}\mathbf{P}_k^2\right) \\ &= \frac{1}{2}(\mathbf{P}_k^2 + \omega^2\mathbf{Q}_k^2), \quad \omega = k \end{aligned} \tag{17}$$

对复色波则为

$$H = \sum_{k,\sigma} H_{k,\sigma} = \sum_{k,\sigma}\frac{1}{2}(\mathbf{P}_{k,\sigma}^2 + \omega^2\mathbf{Q}_{k,\sigma}^2) \tag{17′}$$

根据(17)式，正则方程

$$\frac{\partial H}{\partial \mathbf{P}_k} = \dot{\mathbf{Q}}_k, \quad \frac{\partial H}{\partial \mathbf{Q}_k} = \dot{\mathbf{P}}_k \tag{18}$$

变为

$$\ddot{\mathbf{Q}}_k + \omega^2\mathbf{Q}_k = 0 \tag{19}$$

可见，“正则坐标”满足简谐振动方程. 因此，可将(17′)式理解为用正则坐标 $Q_{k,\sigma}$和正则动量 $P_{k,\sigma}$表出的无穷多个简谐振动的总哈密顿量，或者说，辐射场可以看作是无穷多个独立的简谐振子(independent harmonic oscillators)的集合. 因为这个理由，我们有时说用振子来展开场.

3. 电磁场的薛定谔理论

如果我们接受薛定谔方程作为微观区域运动的普遍规律，就必须考虑对简谐振动(11′)进行量子化的问题，或对(17′)式进行量子化的问题. 必须指出，这样做已经意味着对量子理论的推广，因为量子力学过去所处理的对象是在普通空间的一个粒子的运动，而(11′)式所描绘的则是电磁波的振动. 现在我们就把简谐振动(11′)象对运动的粒子一样进行量子化.

根据薛定谔指出的由经典力学过渡到量子力学的方法，正则共轭变数 $Q_{k,\sigma}$, $P_{k,\sigma}$不再是普通的数，而是满足下列对易关系的算符：

$$[Q_k, P_k] = i\hbar \tag{20}$$

于是就过渡到电磁场的薛定谔理论. 在这个理论中，简谐振动的薛定谔方程是

$$H\Psi = E\Psi \tag{21}$$

即

$$\frac{1}{2}(P_k^2 + \omega^2 Q_k^2)\Psi_k = E\Psi_k \tag{22}$$

或

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2}\nabla^2 Q_k + \omega^2 Q_k^2\right)\Psi_k(Q_k) = E_n^{(k)}\Psi_k(Q_k) \tag{23}$$

式中

$$\nabla Q_k \equiv \left(\frac{\partial}{\partial Q_x}, \frac{\partial}{\partial Q_y}, \frac{\partial}{\partial Q_z}\right)$$

$\Psi_k(Q_k)$代表波矢为 k 的简谐振动的薛定谔波函数.

由$\nabla \cdot A = 0$，我们看到矢量 Q_k 与 k 垂直，因此(11)式和(23)式所描绘的简谐振动只是在垂直于 k 的平面内运动. 令 Q_1 和 Q_2 为 Q_k 在这个平面内沿着两个垂直方向的分量，于是(23)式可分解为两个独立的一维运动：

$$[-\frac{\hbar^2}{2}(\frac{d}{dQ_\sigma})^2 + \omega_k^2 Q_\sigma^2]\Psi_{k,\sigma}(Q_\sigma) = E_n^{(k,\sigma)}\Psi_{k,\sigma}(Q_\sigma) \qquad (24)$$

$$(\sigma = 1,2)$$

上式的解是熟知的，于是，量子简谐振子的本征能量为

$$E_n^{(k,\sigma)} = (n_{(k,\sigma)} + \frac{1}{2})\hbar\omega_k, \quad n_{(k,\sigma)} = 0,1,2,\cdots \qquad (25)$$

上式所给出的能级间隔正是普朗克所引入的能量子 $h\nu_k$. 因此，上面的推导说明，把描述微观粒子运动的薛定谔方程推广应用于电磁运动立即给出普朗克的能量子. 这样，由量子力学可得出电磁场的能量不连续性，与普朗克的能量子说相符合.

由(25)式可求得整个容器内的辐射总能量为

$$E = \sum_k \sum_{\sigma=1,2}(n_{(k,\sigma)} + \frac{1}{2})h\nu_k, \qquad n_{(k,\sigma)} = 0,1,2,\cdots \qquad (26)$$

当 $n_{k,\sigma}=0$ 时得 $E_0 = \sum_k h\nu_k$，称为零点能. 因为简谐振动 k 的数目是无限的，当容器中没有辐射存在时，E_0 的值仍等于无穷大. 这个无穷大的零点能不造成任何观察上的效应，如果我们以真空的态作为能量为零的态的定义，则可取 $E_0=0$.

应该指出，上述能量子只代表一个量子运动的能级间隔，正象氢原子的能级间隔一样. 不过对于氢原子，能级间隔不是一个与能级无关的常量，因此没有导致能量子的概念. 能量子只是作为量子运动的能级间隔而出现这一事实表明，以薛定谔方程为基础的非相对论量子力学虽然成功地阐明了微观运动的能量不连续性，但它却没有反映电磁辐射的能量不连续性实际上是电磁场的粒子所造成的这个观点，也就是认为光量子是和电子一样的微观粒子的观点. 如上所述，这个观点是爱因斯坦提出，后来为光电效应的实验所完全证实的.

§2 非相对论薛定谔方程的量子化·玻色子体系

从上节我们看到，虽然电磁场和电子的微观运动规律都遵循着同样的量子力学的规律，但在我们的认识中实物和场的差异仍然是很大的. 量子理论虽然显示出在微观区域中实物的波动性和电磁场的原子性，这种波动性和原子性与宏观区域中所理解的是迥然不同的. 微观区域内的所谓波动性只意味着几率分布的一种周期性，所谓原子性也只代表能量的不连续性. 这样就使得实物和场的对立在微观区域内更形复杂化，而前面提到的光量子在光电效应里所显示的和电子一样的粒子性，却丝毫没有在理论中得到反映. 现在大家都知道，电子也象光子一样地被发射和吸收，而且光子和电子也可以互相转化；但在 1932 年以前这些现象还未被发现. 尽管这样，当时人们已经感到必须改造以薛定谔方程为基础的量子理论，使得它更充分地显示出实物和场在波动性和粒子性两方面的对称性. 不久人们就发现，薛定谔方程所显示的上述不对称性并不是实质的，这种不对称性可以通过一个新的描述方式的引入而被消除. 这个新的方式就是所谓"二次量子化"描述方式.

1. 非相对论薛定谔方程的量子化

"二次量子化"的描述方式可以形式地由下面步骤得出. 首先我们把单粒子的薛定谔方程看成是和麦克斯韦电磁场波动方程一样的描写经典波动的方程，这个方程的解 $\Psi(r,t)$ 也看成是和 $A(r,t)$ 一样的普通空间的波动；然后对薛定谔方程进行像上节对电磁场波动方程所进行的一样的量子化.

为简单起见，我们假定 $\Psi(r,t)$ 代表一个不受外力作用的自由粒子的波函数. 引入这个没有外力作用的假定的目的是为了可以很容易地阐明某些重要的观点. 如果不引入这个假定，计算将较为复杂，但基本思想和推算的过程仍旧是一样的. 在上述假定下，$\Psi(r,t)$ 所满足的薛定谔方程可写成

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(r,t)=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(r,t) \tag{27}$$

上式描写一个自由粒子的量子运动．如果我们把(27)式看成相当于麦克斯韦方程(4)和(6)式，那么我们就可考虑(23)式在上节所描述的容器内的解．与上节一样，我们引入下面傅立叶展开式：

$$\Psi(r,t)=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_k a_k(t)e^{ik\cdot r} \tag{28}$$

上式右边不需要加上复数共轭项，因为$\Psi(r,t)$本身是一个复数．把(28)式代入(27)式，得到$a_k(t)$所满足的方程

$$\left.\begin{aligned}\frac{d}{dt}a_k(t)&=-i\varepsilon_k a_k(t)\\ \varepsilon_k&=\frac{\hbar k^2}{2m}\end{aligned}\right\} \tag{29}$$

通过对t再进行一次微分，我们由上式得到下面标准的简谐振动方程：

$$\frac{d^2}{dt^2}a_k(t)+\varepsilon_k^2 a_k(t)=0 \tag{30}$$

(26)式的复数共轭为

$$\Psi^*(r,t)=\frac{1}{\sqrt{V}}\sum_k a_k^*(t)e^{-ik\cdot r} \tag{31}$$

很容易证明，$a_k^*(t)$也满足简谐振动方程(30)式．

与上节讨论辐射场的情况一样，为了写出这些简谐振动的薛定谔方程，我们首先必须找出相应的正则动量P_k和正则坐标Q_k．为此，我们考虑这个系统的总能量：

$$E=\int\Psi^* i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi dV=-\int\Psi^*\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi dV \tag{32}$$

将(28)和(31)式代入上式，并利用(27)式，便可得到

$$\left.\begin{aligned}E&=\sum_k\hbar\varepsilon_k a_k^* a_k\\ \varepsilon_k&=\frac{\hbar k^2}{2m}\end{aligned}\right\} \tag{33}$$

与(15)式相似，引入正则变换：

$$
\left.\begin{aligned}
Q_k &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_k}}(a_k + a_k^*) \\
P_k &= -i\sqrt{\frac{\hbar\varepsilon_k}{2}}(a_k - a_k^*)
\end{aligned}\right\} \tag{34}
$$

或

$$
\left.\begin{aligned}
a_k &= \frac{i}{\sqrt{2\hbar\varepsilon_k}}(P_k - i\varepsilon_k Q_k) \\
a_k^* &= \frac{-i}{\sqrt{2\hbar\varepsilon_k}}(P_k + i\varepsilon_k Q_k)
\end{aligned}\right\} \tag{35}
$$

代入(33)式得

$$
E = \frac{1}{2}\sum_k (P_k^2 + \varepsilon_k^2 Q_k^2) \tag{36}
$$

上式与(17)式相似，P_k 和 Q_k 应理解为简谐振动 k 的正则动量和正则坐标．如果我们把 $\Psi(r,t)$ 看成是经典的波动，那么相应的量子运动可以通过通常的量子化条件(参阅(20)式)：

$$
\left.\begin{aligned}
[P_k, Q_{k'}] &= -i\hbar\delta_{kk'} \\
[P_k, P_{k'}] &= [Q_k, Q_{k'}] = 0
\end{aligned}\right\} \tag{37}
$$

给出．这个条件也可以由 a_k 和 a_k^* 之间的对易关系．

$$
\left.\begin{aligned}
[a_k, a_{k'}^+] &= \delta_{kk'} \\
[a_k^+, a_{k'}^+] &= [a_k, a_{k'}] = 0
\end{aligned}\right\} \tag{38}
$$

来表示．利用(28)式和(31)式，可由上式推出 $\Psi(r,t)$ 和 $\Psi^+(r,t)$ 满足的对易关系：

$$
\left.\begin{aligned}
[\Psi(r,t), \Psi^+(r',t)] &= \delta(r - r') \\
[\Psi^+(r,t), \Psi^+(r',t)] &= [\Psi(r,t), \Psi(r',t)] = 0
\end{aligned}\right\} \tag{39}
$$

现在，我们来归纳非相对论薛定谔方程量子化的步骤：如果我们把满足单粒子薛定谔方程的波函数 $\Psi(r,t)$ 不是看成几率波函数，而把它形式上看作类似电磁场的一种经典场，并把它按力学量完全系的本征函数系展开：

$$
\Psi(r,t) = \sum_k a_k(t)\psi_k(r)
$$

(注意：(28)式是按动量的本征函数系展开)．现在我们把 a_k 不再看成是普遍的数，而是满足对易关系(38)式的算符，而 $\Psi(r,t)$ 则

是满足(39)式的算符．这样，我们就完成了非相对论薛定谔方程的量子化，这就是所谓"二次量子化"的描述方式．因为量子状态用波函数 $\Psi(r,t)$ 来描写已经是量子理论了(第一次量子化是由经典粒子向量子力学领域的过渡)，现在再把 $\Psi(r,t)$ 看作算符就意味着第二次量子化(二次量子化是由经典波动向量子力学领域的过渡)，这就是"二次量子化"名称的由来．

下面考察算符 a 和 a^+ 的意义．

定义

$$N_k = a_k^+ a_k \tag{40}$$

为占领数算符(occupation number operator)或粒子数算符．显然它是厄密算符，因为

$$N_k^+ = (a_k^+ a_k)^+ = a_k^+ (a_k^+)^+ = a_k^+ a_k = N_k \tag{41}$$

而

$$N = \sum_k N_k = \sum_k a_k^+ a_k \tag{42}$$

则称为总粒子数算符．这时(33)式可表为

$$H = \sum_k N_k \hbar \varepsilon_k \tag{43}$$

为体系的哈密顿量，其中能级间隔为

$$\hbar \varepsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m \tag{44}$$

这个能量子正是动量为 $p=\hbar k$ 的粒子的动能．显然，N_k 与 $N_{k'}$ 对易，N_k 与 N 及 H 对易，即

$$[N_k, N_{k'}] = 0, \quad [N, N_k] = 0, \quad [H, N_k] = 0 \tag{45}$$

因此，所有的 N_k 及 N，H 有共同的本征态，我们选择其共同本征态为

$$|\varphi_n\rangle = |n_0 n_1 n_2 \cdots n_k \cdots\rangle \tag{46}$$

这种表象通常称为粒子数表象，N_k，N，H 的本征方程如下：

$$\left.\begin{aligned} N_k |\varphi_n\rangle &= n_k |\varphi_n\rangle \\ N |\varphi_n\rangle &= n |\varphi_n\rangle \\ H |\varphi_n\rangle &= E_n |\varphi_n\rangle \end{aligned}\right\} \tag{47}$$

其中 n_k，n 和 E_n 分别表示在态 $|\varphi_n\rangle$ 中算符 N_k、N 和 H 的本征值．如果对所有 k 都有 $n_k=0$，则此态叫真空态(vacuum state)，用 $|\varphi_0\rangle$ 表

示，它满足

$$a_k|\varphi_0\rangle = 0, \quad \langle\varphi_0|\varphi_0\rangle = 1 \tag{48}$$

容易证明，a_k, a_k^+ 与 N_k 满足如下对易关系：

$$[a_k, N_k] = a_k, \quad [a_k^+, N_k] = -a_k^+ \tag{49}$$

从而得到

$$N_k a_k|\varphi_n\rangle = (a_k N_k - a_k)|\varphi_n\rangle = (n_k - 1)a_k|\varphi_n\rangle \tag{50}$$

$$N_k a_k^+|\varphi_n\rangle = (a_k^+ N_k + a_k)|\varphi_n\rangle = (n_k + 1)a_k^+|\varphi_n\rangle \tag{51}$$

由此可见，$a_k|\varphi_n\rangle$也是 N_k 的本征态，其本征值为 n_k-1，亦即 a_k 作用在态$|\varphi_n\rangle$上减少了一个 n_k 态的粒子，因此算符 a_k 称为降低能级算符或消灭算符(annihilation or destruction operator)．同理 $a_k^+|\varphi_n\rangle$也是 N_k 的本征态，其本征值为 n_k+1，亦即 a_k^+ 作用在态$|\varphi_n\rangle$上增加了一个 n_k 态的粒子，因此算符 a_k^+ 称为升高能级算符或产生算符(creation operator)．

这种消灭和产生算符，是量子场论的主要数学工具，反映客观存在着的粒子产生和消灭的转化现象．

因为 $a_k^+|n_0,\cdots,n_k,\cdots\rangle$与$|n_0,\cdots,n_k+1,\cdots\rangle$具有相同的本征值 n_k+1，故它们表示同一个态，因此

$$\left.\begin{aligned} a_k^+|n_0,\cdots,n_k,\cdots\rangle &= c_+\,|n_0,\cdots,n_k+1,\cdots\rangle \\ a_k|n_0,\cdots,n_k,\cdots\rangle &= c_-\,|n_0,\cdots,n_k-1,\cdots\rangle \end{aligned}\right\} \tag{52}$$

同理

容易算出

$$\left.\begin{aligned} |c_+|^2 &= n_k + 1 \\ |c_-|^2 &= n_k \end{aligned}\right\} \tag{53}$$

于是

$$\left.\begin{aligned} a_k|n_0,\cdots,n_k,\cdots\rangle &= \sqrt{n_k}\,|n_0,\cdots,n_k-1,\cdots\rangle \\ a_k^+|n_0,\cdots,n_k,\cdots\rangle &= \sqrt{n+1}\,|n_0,\cdots,n_k+1,\cdots\rangle \end{aligned}\right\} \tag{54}$$

有时，上式简记为

$$\left.\begin{aligned} a|n\rangle &= \sqrt{n}\,|n-1\rangle \\ a^+|n\rangle &= \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \end{aligned}\right\} \tag{54'}$$

值得注意

$$n = \langle n|N|n\rangle = \langle n|a^+a|n\rangle \geqslant 0 \tag{55}$$

这是因为$\langle n|a^+a|n\rangle$表示$a|n\rangle$的模，它必然是正定的．由此可见，粒子数n不能是非整数(noninteger)，否则当a连续作用于$|n\rangle$时最后会出现负的n值，这与(55)式矛盾．因此，n是零或正整数．

最后，我们给出a,a^+和N的矩阵元．由(47)式和(54)式可得

$$\langle n'|N|n\rangle = n\delta_{n'n} \tag{56}$$

$$\langle n'|a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1} \tag{57}$$

$$\langle n'|a|n\rangle = \sqrt{n}\,\delta_{n',n-1} \tag{58}$$

它们的明显矩阵表示为

$$N = \begin{pmatrix} 0 & & & \\ & 1 & & 0 \\ & & 2 & \\ & 0 & & 3 \\ & & & & \ddots \end{pmatrix} \tag{56'}$$

$$a^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0\cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \tag{57'}$$

$$a = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0\cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \tag{58'}$$

2. 多粒子体系薛定谔方程的表象变换

上面我们已经把薛定谔方程看作是一个经典的波动方程，然后再对它进行量子化，并且把这样得到的能量子进一步解释为薛

定谔方程所描写的粒子. 现在我们来证明, 这种作法与当粒子满足玻色-爱因斯坦统计时的通常形式的非相对论量子理论完全等价, 它们之间的差异只在于表象的不同. 为此, 我们只需考虑两个粒子的情况. 在粒子数更多的情况中所需要的考虑是完全相同的. 按照本节的处理方法, 我们考虑只有简谐振动 k_1 和 k_2 激发到有一个能量子的态, 其余的振动都处于基态. 这个状态的态矢量可写为

$$\Psi = a_{k_1}^+ a_{k_2}^+ \Psi_0 \tag{59}$$

其中 Ψ_0 为真空态, 亦即所有简谐振子都处于基态. $a_{k_1}^+ a_{k_2}^+$ 作用于 Ψ_0 使得振动 k_1 和 k_2 各处于有一个能量子的激发态.

引入

$$\psi_k^+(r,t) = a_k^+ e^{-ik\cdot r - i\frac{\hbar k^2}{2m}t} \tag{60}$$

上面所考虑的状态又可写为

$$\Psi = \psi_{k_1}^+(r_1,t)\psi_{k_2}^+(r_2,t)\Psi_0 \tag{61}$$

(59)式和(61)式的差别只在于前者是由动量表象表出, 而后者则由坐标表象表出. 在这两个表象中的总哈密顿算符分别由(33)式和(32)式给出. 于是, Ψ 满足的薛定谔方程可写成

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = -\int \psi^+(r,t)\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r,t)\Psi dV \tag{62}$$

注意到真空态定义(48)式有

$$a_k\Psi_0 = 0 \tag{48'}$$

而由(60)式的复共轭可得

$$\psi_k^+(r,t)\Psi_0 = 0 \tag{63}$$

将(61)式代入(62)式, 并利用(39)式和(63)式, 我们得到

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_{k_1}^+(r_1,t)\psi_{k_2}^+(r_2,t)\Psi_0 = -\sum_{s=1}^{2}\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_s^2\psi_{k_1}^+(r_1,t)\psi_{k_2}^+(r_2,t)\Psi_0$$

于是最后得到

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_{k_1}(r_1,t)\psi_{k_2}(r_2,t) = \sum_{s=1}^{2}\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_s^2\psi_{k_1}(r_1,t)\psi_{k_2}(r_2,t) \tag{64}$$

上式正是在通常量子理论里两个自由的玻色粒子所满足的薛定谔方程. 这证明了前面所述的论点: 在玻色-爱因斯坦统计的条件下,

把单粒子的非相对论薛定谔方程看成经典的宏观的波动方程然后进行量子化和通常把 $\Psi(r,t)$ 看成几率幅的多粒子的非相对论量子理论是完全等价的.

二次量子化方法是研究全同粒子组成的多粒子体系的一种常用的方法.这种方法的要点是用处于一个状态中的粒子数目来描写体系的状态,也就是把多粒子体系的问题由原来的表象(例如坐标表象或能量表象)经过表象变换后换到粒子数表象中去讨论.因此,二次量子化方法的实质是数学上的表象变换,并不意味着任何物理实质上的改变,即不存在客体的第二次量子效应.

从上面的推导和讨论我们看到,由经典波动经过量子化所得到的"能量子"正是由经典粒子经过量子化所得到的微观粒子.根据这个观点,前面的辐射量子理论所给出的能量子 $h\nu$ 应同时代表辐射的粒子结构.这个关于量子现象的新的理解,非常圆满地体现了爱因斯坦所提出的关于光子的概念,同时也成为以后发展起来的场的量子理论的基本思想.

§3 费米子体系

1.反对易关系与泡利不相容原理

上节我们讨论了玻色子体系,即粒子服从玻色-爱因期坦统计情形下的二次量子化方法.对于费米子体系,即粒子服从费米-狄喇克统计的情形,量子化条件(即对易关系)(38)式和(39)式应加以修改,因为费米子遵循泡利不相容原理(Pauli's exclusion principle),即处于一个态的粒子数目只能是 0 或 1.为此,约旦(Jordan)和维格纳(1928 年)建议,费米子的量子化条件改为

$$\left.\begin{aligned} &[a_k,a_{k'}^+]_+\equiv a_ka_{k'}^+ + a_{k'}^+a_k = \delta_{kk'} \\ &[a_k,a_{k'}]_+ = [a_k^+,a_{k'}^+]_+ = 0 \end{aligned}\right\} \tag{65}$$

和

$$\left.\begin{aligned} &[\Psi(r,t),\Psi^+(r',t)]_+ = \delta(r-r') \\ &[\Psi(r,t),\Psi(r',t)]_+ = [\Psi^+(r,t),\Psi^+(r',t)]_+ = 0 \end{aligned}\right\} \tag{66}$$

称为反对易关系(anticommutation relations).

容易证明,上述反对易关系与泡利原理是一致的.事实上,

$$
\begin{aligned}
N_k^2 = (a_k^+ a_k)^2 &= a_k^+ a_k a_k^+ a_k \\
&= a_k^+ (1 - a_k^+ a_k) a_k \\
&= a_k^+ a_k - a_k^{+^2} a_k^2 \\
&= a_k^+ a_k = N_k
\end{aligned} \tag{67}
$$

从而得到其本征值满足

$$n_k^2 = n_k \tag{68}$$

由此得

$$n_k = 0,1 \tag{69}$$

即处于 k 态的粒子数为 0 或 1,与泡利原理一致,故费米子的反对易关系(65)式是泡利原理的要求.

2. 算符 a_k, a_k^+ 和 N_k 的表示

为简便计略去下标 k. 由(65)式有

$$aa^+ + a^+ a = 1, \quad a^2 = a^{+^2} = 0 \tag{70}$$

此外,

$$N = a^+ a \tag{71}$$

以上两式就是待解的矩阵方程.由(68)和(69)式知,N 的本征值为 0 或 1.如果没有简并,N 就能表为对角矩阵

$$N = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{72}$$

为满足(70)式的要求,a 和 a^+可表为

$$a = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad a^+ = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{73}$$

设 N 对应于本征值 0 的本征矢为 $|0\rangle$,对应于本征值 1 的本征矢为 $|1\rangle$,即

$$\left.\begin{aligned} N|0\rangle &= 0|0\rangle = 0 \\ N|1\rangle &= |1\rangle \end{aligned}\right\} \tag{74}$$

则可将 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 表为列矩阵

$$|0\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{75}$$

于是,容易得到 $a|0\rangle = 0, \quad a|1\rangle = |0\rangle$

合写成

$$a|n\rangle = n|1-n\rangle, \quad n = 0,1 \tag{76}$$

又有 $a^+|0\rangle = |1\rangle, \quad a^+|1\rangle = 0$

合写成 $a^+|n\rangle = (1-n)|1-n\rangle, \quad n = 0,1$ (77)

可见，a 和 a^+ 仍起着消灭算符和产生算符的作用.

一般地，(76)式和(77)式可表为

$$\left.\begin{aligned} a_k|n_0\cdots1\cdots\rangle &= |n_0\cdots0\cdots\rangle \\ a_k|n_0\cdots0\cdots\rangle &= 0 \end{aligned}\right\} \tag{78}$$

$$\left.\begin{aligned} a_k^+|n_0\cdots1\cdots\rangle &= 0 \\ a_k^+|n_0\cdots0\cdots\rangle &= |n_0\cdots1\cdots\rangle \end{aligned}\right\} \tag{79}$$

上述二次量子化的描述方式，在费米统计的情况下，也可用与(59)式到(64)式相同的推导，证明是和通常的非相对论量子力学的描述方式等价的. 与玻色统计的情形一样，证明必须以下述先决条件为根据，即波振动的能量子正是薛定谔方程所描写的粒子.

§4 场量子化概念

前面曾经指出，二次量子化方法实际上是表象变换，不包含新的量子效应，在内容上并没有超出旧有的量子力学的范围. 但二次量子化方法的优点在于：

(1) 能把粒子服从的统计规律包括到理论中去. 粒子遵循的不同的统计规律反映在算符 a_k 和 a_k^+ 满足不同的代数关系，即对玻色子而言，a_k 与 a_k^+ 满足对易关系(38)式，对费米子而言，a_k 与 a_k^+ 则满足反对易关系(65)式.

(2) 在新表象里不明显地出现总粒子数，而只包含占有各个能级的粒子数. 这样就提供了相对论量子场论的数学准备，即容易推广到粒子产生和湮没的情形.

(3) 二次量子化方法消除了量子力学对实物粒子和电磁场的不对称描述. 从§1 我们知道，电磁场量子化是由经典波场向量子力学领域的过渡，而实物粒子的量子化则是由经典粒子向量子力学领域的过渡，两者的描述是不对称的. 但在二次量子化方法中，实物粒子的波函数不是看成几率波，而是看作与电磁场一样的经

典场，然后进行量子化，这就与电磁场的量子化处于更对称的地位，使粒子与场的对比更进一步密切起来. 各种物质形式所表现的波动性和粒子性，在二次量子化的描述里得到了进一步的统一. 这种统一的描述将是相对论量子场论的出发点，为量子场论指出了发展方向. 事实上，克莱因-戈登方程和狄喇克方程都可以看作是相当于经典场的方程而按照二次量子化的方法进行量子化.

在量子场论完整地建立起来之前，实验上已经发现了电子偶的产生和 β 衰变现象. 在这些现象里，电子也象光子一样地被吸收或发射，这就提供了把电子场按照电磁场的方式进行量子化的实际要求. 这些新的物理现象的出现，使我们想到，如果把非相对论的二次量子化方法推广到高速的相对论领域内，是否可以用来描写粒子的产生和消灭的转化现象.

我们曾一再指出，在非相对论领域内，二次量子化的描述是和通常的薛定谔量子理论完全等价的. 但在相对论领域里，情形就完全不同. 把克莱因-戈登方程和狄喇克方程看成经典波动方程然后按二次量子化方法进行量子化所得到的理论——量子场论，与把这些方程作为单粒子的相对论方程所得出的理论完全不同. 在量子场论里，负几率和负能量困难已不复存在，而在单粒子相对论量子力学里，负几率和负能量的困难是不可避免的. 这是因为在单粒子的相对论量子力学里保留了波函数的几率解释，而几率解释是以几率守恒为条件的，其物理实质就是粒子数守恒. 但在高速的相对论领域里，存在粒子的产生和消灭的转化现象，粒子数是不守恒的，这就是产生困难的根本原因.

因此，在相对论情形下，应将波函数的几率意义加以改革. 为此，我们把克莱因-戈登方程和狄喇克方程

$$(\partial_\mu^2 - m^2)\Psi = 0$$

$$(\gamma_\mu\partial_\mu + m)\Psi = 0$$

不看成是单粒子的相对论量子力学方程，而认为是和麦克斯韦方程

$$\partial_\mu^2 A = 0$$

相当的经典场方程，即Ψ不再理解为几率意义的波函数，而看作类似电磁场$\boldsymbol{A}$的经典场，然后按照二次量子化方法进行量子化，即把Ψ看作是场算符，并且按照粒子所遵循的统计法则引入量子化条件（对玻色子引入对易关系，对费米子引入反对易关系）．所以，在量子场论时，实物粒子和光子处在相同的位置，并且认为二者的波动性和粒子性都是属于同一客体——量子场的两个方面．这样，量子场的概念就把光和实物，波和粒子的对立完全统一起来了．读者欲知其详，请参阅有关量子场论的书籍．

量子场论主要的成就是：它解释了各种基本粒子的发射和吸收现象，从而正确地描述了物质的不同形式间的相互转换和相互作用的规律；它导出了物质的粒子性和电荷的量子性；它避免了狄喇克理论里的负能困难和克莱因-戈登理论里的负几率困难；它正确地反映出物质在微观运动领域内所反映出来的波动和粒子两种属性以及量子现象和经典极限间的联系；它表达出微观运动和统计规律之间密切的关系．这样，它就把十九世纪中人们认识上的实物和场的对立转变为两种统计规律的对立．在宏观领域里，电磁波作为场的形式和电子作为实物的形式而存在主要是由于它们服从两种不同的统计规律所造成的．量子场论的建立使得人们对于物质世界的认识前进了一大步．

第十一章　路径积分量子化

在前面的课程中，我们已经学过量子力学的两种表述形式：即薛定谔的波动力学形式，这是用解微分方程（薛定谔方程）的方法处理量子力学问题．另一种是海森堡的矩阵力学形式，它是用算符代数的方法处理量子力学问题．这里我们介绍量子力学表述的第三种形式，即所谓路径积分（Path Integrals）形式．

量子力学的路径积分形式，最早是狄喇克于 1933 年在一篇题为《量子力学中的拉氏函数》的文章中提出来①，费曼 1948 年在《非相对论量子力学的时空方法》一文中发展了这一思想②．费曼和希布斯（Hibbs）合著的《量子力学与路径积分》一书给出了用路径积分形式表述量子力学的理论体系③．

量子力学的路径积分形式就是以几率幅的路径积分形式为出发点来表述量子力学的理论形式．近年来，这种理论形式在量子力学特别是在量子场论中有新的发展和广泛应用，取得一些重要的结果．

二十世纪初，实验物理学积累了大量引人注目的现象，表明经典物理学已经不够用，特别是光和电子的波一粒二重性现象是不能用经典概念和理论来解释，于是在 1925 到 1926 年间新的理论——量子力学应运而生．新理论表明，有些实验的精确结果根本不可预言，只好满足于计算各种结果的几率．

在经典力学中，粒子的状态可用它的坐标 x（为简单，用 x 表

---

① P. A. M. Dirac, Physikalische Zeitschrift Sowjetunion, Band 3, Heft 1 (1933), 64.

② R. P. Feynman, Rev. Mod. Phys. 20(1948), 267.

③ R. P. Feynman and A. R. Hibbs, Quantrm Mechanics and Path Integral MC Graw-Hill, New York(1965)，有中译本.

示全部坐标，以下同）和动量 p 两个参量来描述，粒子从时空点 (x_a,t_a) 运动至时空点 (x_b,t_b) 有确定的轨道．而在量子力学里，用几率幅（probability amplitude），即波函数 $\psi(x_a,t_a)$ 来描述粒子的状态，粒子从状态 $\psi(x_a,t_a)$ 变成状态 $\psi(x_b,t_b)$ 没有确定的轨道，可以认为是存在无限多的轨道．这就是说，粒子的几率幅原则上可从 x_a 沿无限多的路径传递到 x_b．路径积分方法的基本思想是：

(1) 粒子从时空点 $a(x_a,t_a)$ 变到时空点 $b(x_b,t_b)$ 有各种路径（轨道），第 i 条路径对 b 点几率幅的贡献 $\psi_i[x(t)]$，遍及由时空点 (x_a, t_a) 到时空点 (x_b,t_b) 各条路径对 b 点几率幅的总贡献为

$$K(x_b,t_b;x_a,t_a) = \sum_i \psi_i[x(t)]$$

(2) 各条路径对几率幅的贡献，其振幅相同，但位相正比于该路径的作用量 s，即

$$\psi_i[x(t)] = Ae^{\frac{i}{\hbar}s_i}$$

(3) 粒子从时空点 a 到时空点 b 的几率 $P(b,a)$ 是几率幅的绝对值平方．即

$$P(b,a) = |K(b,a)|^2$$

可见，路径积分方法中所涉及的只是做为经典量的作用量 s，使得我们可以借助经典力学来表述量子力学．

§1 传播函数与几率幅

在量子力学里，粒子没有确定的轨道．粒子在某一时刻的状态，取决于它在这一时刻以前的全部历史（状态），也就是说在时刻 t_b，在 x_b 处粒子的状态（几率幅）$\psi(x_b,t_b)$ 是由 t_a 时在整个空间各 x 处的状态（几率幅）$\psi(x_a,t_a)$ 以一定的权重传播过去的．或者说，t_a 时每个 x 点的几率幅 $\psi(x,t_a)$ 都以一定的权重对 t_b 时刻 x_b 点的几率幅做出贡献．对 dx 积分得到所有贡献的总和，即

$$\psi(x_b,t_b) = \int K(x_b,t_b;x,t_a)\psi(x,t_a)\mathrm{d}x \tag{1}$$

$K(x_b,t_b;x_a,t_a)$表示 $\psi(x_a,t_a)$对 $\psi(x_b,t_b)$贡献的权重，又称为几率幅由时空点(x_a,t_a)到时空点(x_b,t_b)的传播函数或传播子(propagator). 一般地，上式可改写成

$$\psi(x,t) = \int K(x,t;x',t')\psi(x',t')\mathrm{d}x' \tag{2}$$

为了进一步看出传播函数的物理意义，考虑时刻 t 从 x_0 处出发的一个粒子，这时 $\psi(x,t)=\delta(x-x_0)$于是

$$\psi(x,t) = \int K(x,t;x',t')\delta(x'-x_0)\mathrm{d}x' = K(x,t;x_0,t')$$

可见 $K(x,t;x_0,t')$是从时空点(x_0,t')出发的一个粒子在时空点(x,t)出现的几率幅. 如果知道传播函数 K 和初始状态 $\psi(x,0)$就可以决定任何时刻的状态 $\psi(x,t)$. 因此计算出传播函数 K 就等价于求解了薛定谔方程. 这是表述量子力学的又一方式，下面我们讨论传播函数的路径积分表示.

§2　传播函数(几率幅)的路径积分表示

1. 路径积分的引进

在量子力学里，粒子用物质波来描述，这种物质波的传播没有确定的轨道，可以合理地认为有无限多的轨道. 我们以 1+1 维为例子来说明. 如图 11-1 所示.

设物质波传播的一条路径 (x_0,t_0), (x_1,t_1) …… (x_n,t_n)，它在时间 t_0 到 t_1 间由 x_0 传播到 x_1，在时间 t_i 到 t_{i+1} 间，由 x_i 传播到 x_{i+1}，最后在时刻 t_n 时到达 x_n. 利用量子理论的关系式 $\lambda=h/p$ 和，$\nu=E/h$，物质波从时空点(x_0,t_0)传播到时空点(x_1,t_1)，位产生变化，应乘上一个相因子

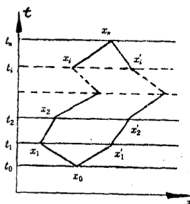


图 11-1

$$e^{i2\pi[\frac{x_1-x_0}{\lambda_1}-\nu_1(t_1-t_0)]}=e^{\frac{i}{\hbar}[P_1(x_1-x_0)-E_1(t_1-t_0)]} \quad (1)$$

当物质波通过整条路径后，位相的变化应乘上的总相因子为：

$$e^{\frac{i}{\hbar}\sum_{i=1}^{n}[P_i(x_i-x_{i-1})-E_i(t_i-t_{i-1})]}=e^{\frac{i}{\hbar}\sum_{i=1}^{n}(P_i\frac{x_i-x_{i-1}}{t_i-t_{i-1}}-E_i)(t_i-t_{i-1})} \quad (2)$$

物质波从时空点(x_0,t_0)出发到达(x_n,t_n)点，除了通过上述路径外，还可以通过另一条路径，例如$(x_0,t_0)(x'_1,t'_1)\cdots\cdots(x_n,t_n)$以及其它的路径. 不同的路径应乘上不同的相因子. 而各条路径的贡献，满足态迭加原理具有相干效应电子双缝衍射实验表明：干涉效应是由于各条路径贡献的几率幅的位相不同引起，而它们的振幅是一样的. 同时，可以合理地认为，各条路径就波的传播来说有同等的贡献(同等的权重). 对所有路径求和可用对每一个$x_i(i=1,2,\cdots\cdots n-1)$从$-\infty$到$+\infty$的积分代替. 因此，干涉后的总波幅(几率幅)为

$$K(x_n,t_n;x_0,t_0)=A\int_{-\infty}^{+\infty}dx_1dx_2\cdots dx_{n-1}e^{\frac{i}{\hbar}\sum_{i=1}^{n}(P_i\frac{x_i-x_{i-1}}{t_i-t_{i-1}}-H_i)(t_i-t_{i-1})} \quad (3)$$

其中A为归一化常数. 已经用H_i代替E_i.

利用经典力学中关系式，$L=P\dot{x}-H$，上式可改写成

$$\begin{aligned}K(x_n,t_n;x_0,t_0)&=A\int_{-\infty}^{+\infty}dx_1\cdots dx_{n-1}e^{\frac{i}{\hbar}\sum_{i=1}^{n}(P_i\dot{x}_i-H_i)(t_i-t_{i-1})}\\&=A\int_{-\infty}^{+\infty}dx_1\cdots dx_{n-1}e^{\frac{i}{\hbar}\sum_{i=1}^{n}L(\dot{x},x)(t_i-t_{i-1})}\end{aligned}$$

将时间间隔t_0到t_n分割到无穷小，其极限就是如下的无穷维积分

$$\begin{aligned}K(x_n,t_n;x_0,t_0)&=\int_{x_0}^{x}[dx]e^{\int_{t_0}^{t_n}\frac{i}{\hbar}L(\dot{x},x)dt}\\&=\int_{x_0}^{x_n}[dx]e^{\frac{i}{\hbar}S}\end{aligned} \quad (4)$$

其中作用量$S=\int_{t_0}^{t_n}L(\dot{x},x)dt$，上式已略去归一化因子，$[dx]$表示对所有时间$t$的$x(t)$作积分$dx_1\cdots dx_n(n\to\infty)$，这是一个无穷维的积分. 它代表对各种路径的贡献求和，所以称为路径积分. (4)式左边的模方$|K|^2$代表粒子从时空点(x_0,t_0)到时空点(x_n,t_n)的传播几率，而右边是经典作用量的路径积分，这就是路径积分量子化的内涵.

2. 传播函数的严格推导

下面，我们从量子力学的几率幅表示式出发，严格地推导出传播函数的路径积分表示式(4).

在海森堡绘景(Heisenberg picture)里，物理态不随时间变化，但算符和基矢都随时间变化，设$|x',t'\rangle$和$|x,t\rangle$是海森堡绘景中t'和t时刻的基矢(坐标表象)，$\theta(t)$是位置坐标算符. 则有

$$\theta(t)|x,t\rangle = x|x,t\rangle \tag{5}$$

$$\theta(0)|x,0\rangle = x|x,0\rangle \tag{6}$$

海森堡绘景中不同时刻算符之间的关系

$$\theta(t) = e^{\frac{iHt}{\hbar}}\theta(0)e^{-\frac{iHt}{\hbar}} \tag{7}$$

将(7)代入(5)得到

$$\theta(t)|x,t\rangle = e^{\frac{iHt}{\hbar}}\theta(0)e^{-\frac{iHt}{\hbar}}|x,t\rangle = x|x,t\rangle$$

可以看出

$$|x,t\rangle = e^{\frac{iHt}{\hbar}}|x,0\rangle \equiv e^{\frac{iHt}{\hbar}}|x\rangle \tag{8}$$

是上式的解. 上式给出本征值相同(都为x)但时刻不同的态矢之间的关系. 下面，推导在时刻t处于x处，而时刻t'处于x'处粒子几率幅

$$K(x',t';x,t) \equiv \langle x',t'|x,t\rangle \tag{9}$$

的路径积分表式. 我们将时间间隔$t'-t$分成n个小区间$\varepsilon, t=t_0, t_1, t_2, \cdots, t'=t_n$, $t_k=t_0+K\varepsilon$. 利用同一时刻算符本征矢的封闭性

$$\int dx|x,t\rangle\langle x,t| = 1$$

插入每一时刻t_k的中间态，于是

$$\langle x',t'|x,t\rangle = \int dx_1 dx_2 \cdots dx_{n-1}\langle x',t'|x_{n-1},t_{n-1}\rangle \cdot \langle x_{n-1}, t_{n-1}|x_{n-2},t_{n-2}\rangle \cdots\cdots \langle x_1,t_1|x,t\rangle \tag{10}$$

利用(8)式有

$$\langle x_l,t_l|x_{l-1},t_{l-1}\rangle = \langle x_l|\exp[-\frac{iH}{\hbar}(t_l - t_{l-1})]|x_{l-1}\rangle$$

$$= \langle x_l|\exp[-\frac{i\varepsilon H}{\hbar}]|x_{l-1}\rangle \tag{11}$$

其中 $\varepsilon=(t_n-t_0)/n=t_l-t_{l-1}$表示一个小的时间间隔.

同一时刻，θ 的本征矢的正交归一性和封闭性定义为：

$$\langle x|x'\rangle=\delta(x-x'),\quad \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x|x\rangle\langle x|=1 \tag{12}$$

动量本征矢$|p\rangle$的正交归一性和封闭性定义为：

$$\langle p|p'\rangle=\delta(p-p'),\quad \int\mathrm{d}p|p\rangle\langle p|=1 \tag{13}$$

则
$$\langle p|x\rangle=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{1/2}e^{-\frac{i}{\hbar}px},\quad \langle x|p\rangle=\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{1/2}e^{\frac{i}{\hbar}px} \tag{14}$$

我们有
$$\begin{aligned}\langle x_l|p^n|x_{l-1}\rangle&=\int\mathrm{d}p\langle x_l|p\rangle\langle p|p^n|x_{l-1}\rangle\\&=\int\frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}p\cdot(x_l-x_{l-1})}p^n\end{aligned} \tag{15}$$

同样可证. 当 $\varepsilon\to0$ 时有

$$\left.\begin{aligned}\langle x_l|\theta^n|x_{l-1}\rangle&=\int\frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}p(x_l-x_{l-1})}\cdot\left(\frac{x_l+x_{l-1}}{2}\right)^n\\\langle x_l|p^n\theta^m|x_{l-1}\rangle&=\int\frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}p^n\left(\frac{x_l+x_{l-1}}{2}\right)^m e^{\frac{i}{\hbar}p(x_l-x_{l-1})}\end{aligned}\right\} \tag{16}$$

将(11)式中的 $H(\theta,p)$展开成 θ 和 p 的幂级数，再逐项利用(15)和(16)式，然后合并，可得到

$$\begin{aligned}\langle x_l,t_l|x_{l-1},t_{l-1}\rangle&=\langle x_l|\exp\left(-\frac{i\varepsilon H}{\hbar}\right)|x_{l-1}\rangle\\&=\int\frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}\exp\left[\frac{i}{\hbar}p(x_l-x_{l-1})\right]\\&\quad\cdot\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\varepsilon H\left(p,\frac{x_l+x_{l-1}}{2}\right)\right]\\&=\int\frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}\exp\frac{i}{\hbar}\left[p\cdot\frac{x_l-x_{l-1}}{\varepsilon}\right.\\&\quad\left.-H\left(p,\cdot\frac{x_l+x_{l-1}}{2}\right)\right]\varepsilon\end{aligned} \tag{17}$$

将上式代入(10)式得

$$\langle x',t'|x,t\rangle=\lim_{n\to\infty}\int\prod_{i=1}^{n-1}\mathrm{d}x_i\int\prod_{i=1}^{n}\frac{\mathrm{d}p_i}{2\pi\hbar}\cdot\exp\left\{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{n}\left[p_i\frac{(x_j-x_{j-1})}{\varepsilon}\right.\right.$$

$$-H(p_j,\frac{x_j+x_{j+1}}{2})]\varepsilon\} \tag{18}$$

当 $n\to\infty$时，$\varepsilon\to 0$，上式可写成

$$\langle x',t'|x,t\rangle=\int[\frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}][\mathrm{d}x]\exp\{\frac{i}{\hbar}\int_t^{t'}[p\dot{x}-H(p,x)]\mathrm{d}t\} \tag{19}$$

其中$[\mathrm{d}p][\mathrm{d}x]$表示对一切可能路径积分．通常对 $\mathrm{d}p$ 的积分可用高斯积分公式积出，常用的高斯型积分公式是

$$\left.\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{\infty}e^{\pm ip^2}\mathrm{d}p=\sqrt{\pm i\pi},\\
&\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ap^2}\mathrm{d}p=\sqrt{\frac{\pi}{a}}\\
&\int_{-\infty}^{\infty}e^{-iap^2-\varepsilon p^2}\mathrm{d}p=\sqrt{\frac{\pi}{ia+\varepsilon}},\\
&\int_{-\infty}^{\infty}e^{\beta p-ap^2}\mathrm{d}p=\sqrt{\frac{\pi}{a}}e^{\beta^2/4a},\\
&\int_{-\infty}^{\infty}e^{i\beta p-ap^2}\mathrm{d}p=\sqrt{\frac{\pi}{a}}e^{-\beta^2/4a},\\
&\int_{-\infty}^{\infty}e^{i\beta p-(ia+\varepsilon)p^2}\mathrm{d}p=\sqrt{\frac{\pi}{ia+\varepsilon}}e^{-\beta^2/4(ia+\varepsilon)}\\
&\int_{-\infty}^{\infty}pe^{-ap^2+bp}\mathrm{d}p=\sqrt{\frac{\pi}{a}}(\frac{b}{a})e^{b^2/4a},\\
&\int_{-\infty}^{\infty}p^2e^{-ap^2+bp}\mathrm{d}p=\sqrt{\frac{\pi}{a}}(\frac{1}{2a})(1+\frac{b^2}{2a})e^{b^2/2a}
\end{aligned}\right\} \tag{20}$$

其中 ε 是为了使积分有限而引进的截断因子，可令其等于零．利用上式得

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}\exp[\frac{i}{\hbar}\varepsilon(p\dot{x}-\frac{1}{2m}p^2)]=\sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon}}\exp\frac{i}{\hbar}(\frac{m}{2}\varepsilon\dot{x}^2) \tag{21}$$

设 H 是 P 和 θ 的如下多项式

$$H=\frac{1}{2m}p^2+V(Q) \tag{22}$$

将上式代入(18)式,利用(21)式可得

$$
\begin{aligned}
K(x',t';x,t) &= \langle x',t' | x,t\rangle \\
&= \lim_{n\to\infty}\int\prod_{i=1}^{n-1}\mathrm{d}x_i\int\prod_{i=1}^{n}\frac{\mathrm{d}p_i}{2\pi\hbar}\cdot\exp\{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{n}[(p_j\dot{x}_j-\frac{1}{2m}p_j^2) \\
&\quad - V(\frac{x_j+x_{j-1}}{2})]\varepsilon\} \\
&= \lim_{n\to\infty}\int\prod_{i=1}^{n-1}\mathrm{d}x_i(\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon})^{\frac{n}{2}} \\
&\quad \cdot\exp\{\frac{i}{\hbar}\sum_{j=1}^{n}[\frac{1}{2}m\dot{x}^2-V(\frac{x_j+x_{j-1}}{2})]\varepsilon\} \qquad (23)
\end{aligned}
$$

当 $n\to\infty,\varepsilon\to 0$,时

$$
\begin{aligned}
\langle x',t' | x,t\rangle &= \int(\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon})^{n/2}[\mathrm{d}x]\exp[\frac{i}{\hbar}\int_t^{t'}L(x,\dot{x})\mathrm{d}t] \\
&= A\int[\mathrm{d}x]\exp[\frac{i}{\hbar}\int_t^{t'}L(x,\dot{x})\mathrm{d}t] \\
&= A\int[\mathrm{d}x]\exp[\frac{i}{\hbar}S] \qquad (24)
\end{aligned}
$$

其中$\int_{x_0}^{x_n}[\mathrm{d}x]=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\cdots\mathrm{d}x_{n-1}$,表示从 t_0到 t_n 内对联结 x_0和 x_n 的所有路径积分,而 $A=(\frac{m}{2\pi i\varepsilon\hbar})^{n/2}$是与 x 无关的常数,L 和 S 分别为经典拉氏量和作用量

$$
L=\frac{1}{2}m\dot{x}^2-V(x)
$$

$$
S=\int_t^{t'}L(x,\dot{x})\mathrm{d}t
$$

(24)与用朴素方法得到的结果(4)式一致(其中 A 作为归一化因子可以略去). 对于 H 不是取(22)式简单形式,而 H 中 p 和 x 存在交叉项的性况,通过较繁复的计算,可证明,传播函数(几率幅)仍有(24)式的路径积分形式.

§3 矩阵元的路径积分表示

利用前面的结果，可得到物理的矩阵元的路径积分形式.

设 t_i 是任一时间点，则坐标算符的本征方程

$$Q(t_i) = |x_i,t_i\rangle = x_i|x_i,t_i\rangle \tag{1}$$

用类似推导(24)式的方法，可得 $Q(t_i)$ 的矩阵元

$$\begin{aligned}
&\langle x',t'|Q(t_i)|x,t\rangle \\
&=\int dx_1dx_2\cdots dx_{n-1}\langle x',t'|x_{n-1}t_{n-1}\rangle\langle x_{n-1}t_{n-1}|x_{n-2}t_{n-2}\rangle\cdots \\
&\quad\cdot\langle x_{i+1},t_{i+1}|Q(t_i)|x_i,t_i\rangle\cdots\langle x_1,t_1|x,t\rangle \\
&=\int dx_1dx_2\cdots dx_{n-1}x(t_i)\langle x',t'|x_{n-1}t_{n-1}\rangle\cdots\langle x_1t_1|x,t\rangle \\
&=\int(\frac{dp}{2\pi\hbar})[dx]x(t_i)\exp\{\frac{i}{\hbar}\int[p\dot{x}-H(p,x)]dt\}
\end{aligned} \tag{2}$$

上式最后一步用重复推导(24)式的方法得到.

设 $t'>t_i>t_j>t$，则有

$$\begin{aligned}
&\langle x',t'|Q(t_i)Q(t_j)|x,t\rangle \\
&=\int dx_1dx_2\cdots dx_{n-1}\langle x',t'|x_{n-1}t_{n-1}\rangle\cdots\cdots\langle x_{i+1},t_{i+1}|Q(t_i)|x_i,t_i\rangle\cdots \\
&\quad\langle x_{j+1},t_{j+1}|Q(t_j)|x_j,t_j\rangle\cdots\cdots\langle x_1,t_1|x,t\rangle \\
&=\int dx_1dx_2\cdots dx_{n-1}x(t_i)x(t_j)\cdot\langle x',t'|x_{n-1}t_{n-1}\rangle\cdots\langle x_1t_1|x,t\rangle \\
&=\int[\frac{dp}{2\pi\hbar}][dx]x(t_i)x(t_j)\exp\{\frac{i}{\hbar}\int_t^{t'}[p\dot{x}-H(p,x)]dt\}
\end{aligned} \tag{3}$$

上式右边的 $x(t_i)$，$x(t_j)$ 是经典量，可随意调动位置，而左边 $Q(t_i)$，$Q(t_j)$ 是算符，不能随意调动位置，在推导中，我们使用了条件 $t'>t_i>t_j>t$，只有满足这个条件，才能将 $Q(t_i)$、$Q(t_j)$ 安排在恰当的时间格点上，当 $t_i<t_j$ 时，我们必须排成 $Q(t_j)Q(t_i)$ 后才能重复上面的推导. 故算符 $Q(t_j)Q(t_i)$ 必须按时间先后自右至左排列，(3)式才能成立. 可推广到有多个 $Q(t_i)$ 的情况，这时有

$$\langle x',t'|Q(t_1)Q(t_2)\cdots Q(t_n)|x,t\rangle$$

$$=\int\left[\frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}\right][\mathrm{d}x]x(t_1)x(t_2)\cdots x(t_n)\exp\{i\int_t^{t'}[p\dot{x}-H]\mathrm{d}t\}\qquad(4)$$

§4 自由粒子的传播函数

用路径积分方法求解具体问题，由于是泛函积分，常常是十分困难的，作为路径积分方法的简单应用的例子，我们求自粒子的传播函数.

自由粒子的作用量

$$S=\int_{t_0}^{t_n}L(x,\dot{x},t)\mathrm{d}t=\int_{t_0}^{t_n}\frac{1}{2}m\dot{x}^2\mathrm{d}t$$

或写成

$$S=\sum_{i=1}^{n}\frac{m}{2}\left(\frac{x_i-x_{i-1}}{\varepsilon}\right)^2\varepsilon\qquad(1)$$

将上式代入§2(24)式得自由粒子的传播函数

$$K(x_n,t_n;x_0,t_0)=\langle x_n,t_n|x_0,t_0\rangle$$

$$=\lim_{n\to\infty,\varepsilon\to0}A\int_{-\infty}^{\infty}dx_1\cdots dx_{n-1}\exp\left[\frac{im}{2\hbar}\sum_{i=1}^{n}\frac{(x_i-x_{i-1})^2}{\varepsilon}\right]\qquad(2)$$

为积分方便，做变换

$$Z_i=\left(\frac{m}{2\hbar\varepsilon}\right)^{1/2}x_i\qquad(3)$$

前式改写成

$$K(x_n,t_n;x_0,t_0)=\lim_{n\to\infty,\varepsilon\to0}A\left(\frac{2\hbar\varepsilon}{m}\right)^{(n-1)/2}\int_{\infty}^{-\infty}dz_1\cdots dz_{n-1}$$

$$\cdot\exp\left[-\sum_{i=1}^{n}\frac{(z_i-z_{i-1})^2}{i}\right]\qquad(4)$$

利用§2(20)式第4式可得

$$\int_{-\infty}^{\infty}\exp\{-\frac{1}{i}[(z_2-z_1)^2+(z_1-z_0)^2]\}\mathrm{d}z_1$$

$$=\left(\frac{i\pi}{2}\right)^{1/2}e^{-(z_2-z_0)^2/2i}\qquad(5)$$

将上式代入(4)式并对 dz_2 积分，可得

$$(\frac{i\pi}{2})^{1/2}\int_{\infty}^{-\infty} e^{-(z_3-z_2)^2/i}e^{-(z_2-z_0)^2/2i}dz_2$$

$$=[\frac{(i\pi)^2}{3}]^{1/2}e^{-(z_3-z_0)^2/3i} \tag{6}$$

经过 $n-1$次积分，即有

$$\int_{\infty}^{-\infty} dz_1\cdots dz_{n-1}\exp[-\sum_{i=1}^{n}\frac{(z_i-z_{i-1})^2}{i}]$$

$$=\frac{(i\pi)^{(n-1)/2}}{n^{1/2}}\cdot e^{-(z_n-z_0)^2/ni}$$

$$=[\frac{(i\pi)^{n-1}}{n}]^{1/2}\cdot e^{-m(x_n-x_0)^2/(2\hbar\varepsilon ni)}$$

将上式代入(4)式，并以 $A=(\frac{m}{2\pi\hbar\varepsilon i})^{n/2}$和 $n\varepsilon=t_n-t_0$代入得

$$K(x_n,t_n;x_0,t_0)=A(\frac{2\pi\hbar\varepsilon i}{m})^{n/2}(\frac{m}{2\pi\hbar\varepsilon ni})^{1/2}$$

$$\cdot\exp[\frac{im(x_n-x_0)^2}{2\hbar n\varepsilon}]$$

$$=[\frac{m}{2\pi\hbar i(t_n-t_0)}]^{1/2}\exp[\frac{im(x_n-x_0)^2}{2\hbar(t_n-t_0)}] \tag{7}$$

这就是自由粒子的传播函数.上式的位相正是自由粒子的经典作用量

$$S_{cl}=\frac{m}{2}\cdot\frac{(x_n-x_0)^2}{t_n-t_0} \tag{8}$$

这表明:对自由粒子，无数条路径对传播函数位相的贡献，等于经典路径对传播函数位相的贡献.

将(7)式代入§1中第(2)式，可得自由粒子的波函数(令初始时刻 $t=0$时，$\psi(x',0)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipx'/\hbar}$)

$$\psi(x,t)=\int K(xt,x'0)\psi(x',0)dx'$$

$$=\int(\frac{m}{2\pi\hbar ti})^{1/2}e^{im(x-x')^2/2\hbar t}\cdot\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipx'/\hbar}dx'$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{i(px'-Et)/\hbar} \tag{9}$$

上式与用求解薛定谔微分方程的方法所得到的结果一致.

§5 路径积分形式与波动力学的等价性

在经典力学中,牛顿表述形式着重体系状态的瞬时的、局域的变化,用微分方程描述.而最小作用量原理表述则着重全域的有限时间间隔内体系的变化.类似地,在量子力学中,波动力学形式着重体系状态的瞬时的、局域的变化,用薛定谔微分方程来描述,而路径积分形式,则强调全域的、有限时间内状态的传播.下面,我们从路径积分形式出发,导出波动力学形式的薛定谔方程,以说明两种形式的等价性.

由§1(2)式,我们得到无限短时间 ε 内波函数的演化为

$$\psi(x,\varepsilon)=\int_{-\infty}^{\infty}K(x,\varepsilon,x',0)\psi(x',0)\mathrm{d}x' \tag{1}$$

体系的拉格朗日函数为

$$L=\frac{1}{2}m\dot{x}^2-V(x,t) \tag{2}$$

体系的作用量(注意 ε 为无穷小量)

$$\begin{aligned}S&=\int_0^{\varepsilon}L\mathrm{d}t=\Big[\frac{m}{2}\Big(\frac{x-x'}{\varepsilon}\Big)^2-V\Big(\frac{x+x'}{2},\frac{\varepsilon}{2}\Big)\Big]\varepsilon\\&=\frac{m}{2}\frac{(x-x')^2}{\varepsilon}-V\Big(\frac{x+x'}{2},0\Big)\varepsilon\end{aligned} \tag{3}$$

最后一个等号是因为我们只考虑到 ε 的一次项,故略去 V 中的 ε. 将(3)式代入§2(24)式,由于 $\psi(x,\varepsilon)$ 和 $\psi(x',0)$ 的时间间隔为 ε,所以 $n=1$,只有 $x_0=x'$ 和 $x_1=x$ 两个固定点,因此,求 K 时不必对 x_i 求积分.故传播函数

$$K(x,\varepsilon,x',0)=\Big(\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon}\Big)^{1/2}\exp\Big\{\frac{i}{\hbar}\Big[\frac{m(x-x')^2}{2\varepsilon}-\varepsilon V\Big(\frac{x+x'}{2},0\Big)\Big]\Big\}. \tag{4}$$

将上式代入(1)式得

$$\psi(x,\varepsilon)=\left(\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[\frac{im(x-x')^2}{2\varepsilon\hbar}\right]$$

$$\cdot\exp\left[-\frac{i\varepsilon}{\hbar}V\left(\frac{x+x'}{2},0\right)\right]\psi(x'0)\mathrm{d}x' \qquad (5)$$

积分号下的指数因子 $\exp\left[\frac{im(x-x')^2}{2\varepsilon\hbar}\right]$，由于 ε 为无限小，$\hbar$ 也很小，故当 x' 变化时，它迅速振荡，而 $\psi(x',0)$ 是一光滑函数，所以两者的乘积在大部分区域贡献为零. 只有位相稳定的区域，才对积分有贡献，而仅在 $x=x'$(位相差为零)的附近，并满足

$$\frac{m(x-x')^2}{2\varepsilon\hbar}<\pi$$

的 x' 才出现相干相长. 令 $\xi=x'-x$，由上式有

$$|\xi|<\left(\frac{2\pi\hbar\varepsilon}{m}\right)^{1/2}$$

可见，ξ 与 $\sqrt{\varepsilon}$ 同量级. 利用 ξ 替换 x'，(5)式可改写成

$$\psi(x,\varepsilon)=\left(\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[\frac{im\xi^2}{2\hbar\varepsilon}\right]$$

$$\cdot\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\varepsilon V\left(x+\frac{\xi}{2},0\right)\right]\psi(x+\xi,0)\mathrm{d}\xi \qquad (6)$$

将上式展开，保留 ε 的一级项和 ξ 的二级项，即取

$$\psi(x+\xi,0)=\psi(x,0)+\xi\frac{\partial\psi}{\partial x}+\frac{1}{2}\xi^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\cdots \qquad (7)$$

$$\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\varepsilon V\left(x+\frac{\xi}{2},0\right)\right]=1-\frac{i\varepsilon}{\hbar}V\left(x+\frac{\xi}{2},0\right)+\cdots$$

$$=1-\frac{i}{\hbar}\varepsilon V(x,0)+\cdots \qquad (8)$$

将(7)和(8)代入(6)，只保留 ε 的一级项和 ξ 的二级项，则有

$$\psi(x,\varepsilon)=\left(\frac{m}{2\pi\hbar i\varepsilon}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[\frac{im\xi^2}{2\hbar\varepsilon}\right]$$

$$\cdot\left[\psi(x,0)-\frac{i}{\hbar}\varepsilon V(x,0)\psi(x,0)+\xi\frac{\partial\psi}{\partial x}+\frac{\xi^2}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right]\mathrm{d}\xi \qquad (9)$$

由 § 2(20)的积分公式有

$$\left.\begin{aligned}&\int_{-\infty}^{\infty}\xi e^{-ia\xi^2}d\xi=0\\&\int_{-\infty}^{\infty}\xi^2e^{\pm ia\xi^2}\mathrm{d}\xi=\frac{1}{\mp 2a}\sqrt{\frac{\mp i\pi}{a}}\\&\int_{-\infty}^{\infty}e^{ia\xi^2}\mathrm{d}\xi=\sqrt{\frac{-i\pi}{a}}\end{aligned}\right\}\tag{10}$$

利用(10)式,(9)式变成

$$\begin{aligned}\psi(x,\varepsilon)-\psi(x,0)&=\frac{-i\varepsilon}{\hbar}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x,0)\right]\psi(x,0)\\&=-\frac{-i}{\hbar}\varepsilon H\psi(x,0)\end{aligned}\tag{11}$$

当 $\varepsilon\to 0$时,

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\psi(x,\varepsilon)-\psi(x,0)}{\varepsilon}=\frac{\partial\psi(x,0)}{\partial t}\tag{12}$$

于是有

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,0)}{\partial t}=H(x,0)\psi(x,0)$$

一般地有

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=H(x,t)\psi(x,t)\tag{13}$$

这就是薛定谔方程.从上面的推导可见,当取无限短时间 $\varepsilon\to 0$时,路径积分形式的演化方程(1)的极限就是波动力学的瞬时表达式——薛定谔微分方程.这说明了量子力学的路径积分表述和波动力学表述的等价性.

参 考 文 献

1 Eugene P. Wigner. Group Theory and its Application to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra (1959)

2 Frederick W Byron, Jr. Robert W Fuller. Mathematics of Classical and Quantum Physics (1969)

3 A. W. Joshi. Elements of Group Theory for Physicists (1977)

4 A. W. Joshi. Matrices and Tensors in Physics (1975)

5 J. P. Elliott and P. G. Dawber. Symmetry in Physics (1979)

6 Tonda and Ghirardi. Symmetry Principles in Quantum Mechanics (1970)

7 谢希德,蒋平,陆奋. 群论及其在物理学中的应用. 北京:科学出版社,1986

8 李政道. 场论与粒子物理学(上册). 北京:科学出版社,1980

9 曾谨言. 量子力学. 北京:科学出版社,1981

10 周世勋. 量子力学. 上海:上海科技出版社,1961

11 余寿绵. 高等量子力学. 济南:山东科技出版社,1985

12 Paul Roman. Advanced Quantum Theory. Addison- Wesley Publishing Company, Inc. ,1965

13 P. A. Dirac. The Principles of Quantum Mechanics, 4th ed.. Oxford University Press, 1958

14 Cohen-Tannoudji, Diu, Laloë. Quantum Mechanics. Hermann and John Wiley & Sons Inc. ,1977

15 E. H. Condon and G. H. Shortley. Theory of Atomic Spectra. Cambridge University Press, 1935

16 Albert Messiah. Quantum Mechanics. North-Holland Pub. Co. ,Amsterdam, 1961

17 L. D. Landau & E. M. Lifshitz. Quantum Mechanics, 3rd ed.. Oxford, Pergamon Press Ltd. ,1977

18 A. S. Davydov, Quantum Mechanics, 2nd ed.. Oxford, Pergamon Press Ltd. ,1976

19 A. A. Sokolov, Z. M. Ternov and U. Ch. ZHukovskii. Quantum Mechanics. Mir Publichers, Moscow, 1984

20 Eugen Merzbacher. Quantum Mechanics, 2nd ed.. New York: John Wiley & Sons Inc. ,1970

21 J. J. Sakurai. Advanced Quantum Mechanics. Landon: Addison-Wesley, 1978

22 R. P. Feynman et al.. The Feynman Lectures on Physics, Vol. 3. Quantum Mechanics, 1965

23 Leonard I. Schiff. Quantum Mechanics, 3rd ed.. New York: MeGraw-Hill, Inc. , 1968

24 Wu, Ta-You. Quantum Mechanics. Singapore, World Scientific, 1986

25 P. A. Dirac. Physikalische Zeitschrift Sowjetunion, Band 3, Heft 1(1933), 64

26 R. P. Feynman. Rev. Mod. Phys. 20(1948), 267

27 R. P. Feynman and A. R. Hibbs. Quantum Mechanics and Path Integrals. New York: McGraw-Hill, Inc. ,1965